

Über die Talk- und Protoenstatit- Struktur und ihre strukturellen Beziehungen

von

Basilios Perdikatsis

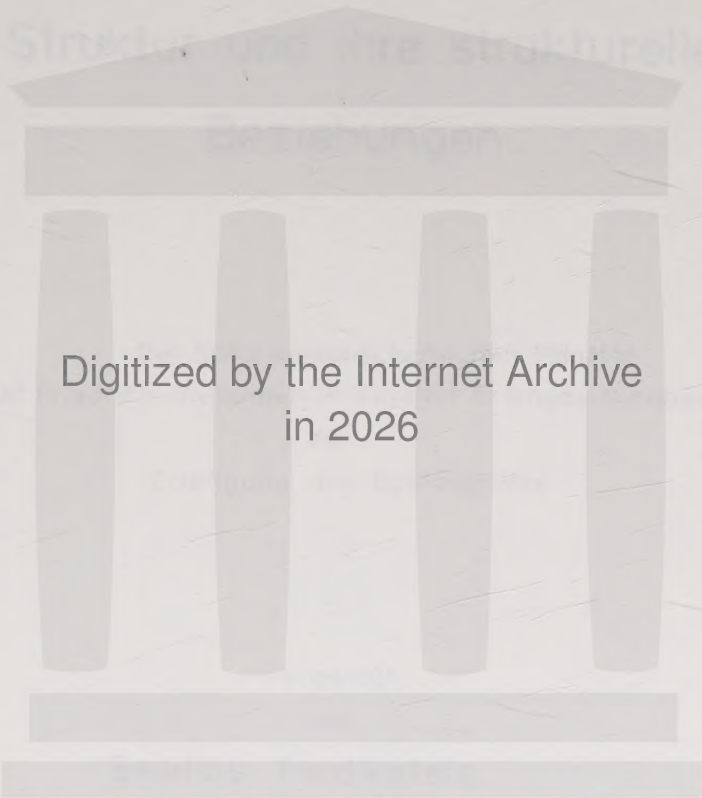
aus

Giannitsa/Griechenland

1972 № 417



Über die Talle und Proteinstoff-
Struktur und ihre strukturellen
Beziehungen.



Digitized by the Internet Archive
in 2026



Über die Talk- und Protoenstatit- Struktur und ihre strukturellen Beziehungen.

Der Naturwissenschaftlichen Fakultät
der Friedrich-Alexander-Universität Erlangen-Nürnberg
zur
Erlangung des Doktorgrades

vorgelegt
von
Basilios Perdikatsis
aus
Giannitsa /Griechenland

Als Dissertation genehmigt von der Naturwissenschaftlichen
Fakultät der Universität Erlangen-Nürnberg.



Tag der mündlichen Prüfung: 10 Mai 1972

Dekan: Prof. Dr. K. Jacobs

Erstberichterstatter: Prof. Dr. Th. Ernst

Zweitberichterstatter: Prof. Dr. H. Burzlaff

Die vorliegende Arbeit entstand in der Zeit vom Juli 1969 bis zum Dezember 1971 im Mineralogischen Institut der Universität Erlangen-Nürnberg.

Herrn Prof. Dr. Th. Ernst möchte ich für die Überlassung des Themas und die ständige Förderung danken.

Herrn Prof. Dr. H. Burzlaff danke ich für die fortwährenden Anregungen und Diskussionen bei der Durchführung dieser Arbeit.

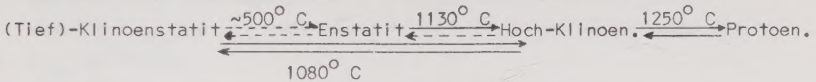
Weiterhin bin ich zu Dank verpflichtet Fr. Dr. R. Böhme für zahlreiche Hinweise bei der Durchführung der Rechenarbeiten, ferner Herrn Dr. H. Schaeffer für die Elektronenraster-Aufnahmen und Herrn cand. phys. M. Gomm für die Diffraktometermessungen.

Inhaltsverzeichnis

Einleitung	1
Bisherige Untersuchungen über TALK	3
Bisherige Untersuchungen über Protoenstatit	6
Strukturbestimmung und Verfeinerung am TALK	
Experimentelles	9
Strukturbestimmung	
a) Patterson-Funktion	14
b) Direkte Methode	15
Strukturverfeinerung	18
Eine neue Strukturvariante vom TALK	20
Strukturaufklärung von TALK II	21
Strukturbeschreibung	22
Weiter Strukturvarianten	27
Basistransformation und reduzierte Zelle	29
Strukturbestimmung und Verfeinerung am Protoenstatit	
Experimentelles	32
Einkristalluntersuchungen	37
Strukturbestimmung	39
Optische Untersuchungen und metrische Be- ziehungen zwischen TALK und Protoenstatit	44
Beschreibung des Protoenstatit-Struktur	48
Strukturelle Beziehungen zwischen TALK und Protoenstatit	50
Zusammenfassung	55
Anhang	
Vergleich zwischen den Raumgruppen C_{2h}^1 und P_1^1	57
F_o -, F_c -Werte von TALK I	58
F_o -, F_c -Werte von TALK II	63
F_o -, F_c -Werte von Protoenstatit	77
Literaturverzeichnis	79

Einleitung

Unter den gesteinsbildenden Mineralien sind die Pyroxene von besonderer Bedeutung, weil man sie zur Klassifikation der Gesteine, besonders der Basalte heranziehen kann. Pyroxene sind Ketten-silikate, die aus linearen $(\text{SiO}_3)^{-2}$ -Ketten bestehen. Sie treten im System MgO-SiO_2 als Silikate der Formel MgSiO_3 auf. Mg^{2+} kann teils durch Ca^{2+} , Fe^{2+} , Na^+ , Li^+ , Mn^{2+} , Ni^{2+} , Al^{3+} , Fe^{3+} , Cr^{3+} und Ti^{3+} ersetzt werden. Si^{4+} kann in geringen Mengen durch Al^{3+} ersetzt werden. Bei Betrachtung des reinen MgSiO_3 unterscheidet man die Modifikationen Orthoenstatit, Klinoenstatit und Protoenstatit. Nach R. SCHWAB (1969) bestehen zwischen diesen Phasen folgende Stabilitätsbeziehungen:



Nach diesen Untersuchungen liegt zwischen den schon bekannten Phasen Enstatit und Protoenstatit eine neue Phase, der Hoch-Klinoenstatit; Sie wurde früher dem Klinoenstatit gleichgesetzt. Während die Strukturen von Tief-Klinoenstatit und Orthoenstatit bekannt sind, läßt sich eine Struktur-Aufklärung von Hoch-Klinoenstatit und Protoenstatit kaum durchführen, weil beide Phasen nach Abkühlen in Tief-Klinoenstatit übergehen.

(1930) stellte jedoch HARALDSEN fest, daß bei der thermischen Zersetzung von Talk eine Pyroxenphase entsteht, die dem Protoenstatit zugeordnet wurde. Es wird im allgemeinen angenommen, daß die bei der Zersetzung freiwerdende Kieselsäure gemäß der Gleichung $\text{Mg}_3[(\text{OH})_2\text{Si}_4\text{O}_{10}] \xrightarrow{>850^\circ \text{ C}} 3\text{MgSiO}_3 + \text{SiO}_2 + \text{H}_2\text{O}$ stabilisierend auf den entstehenden Protoenstatit wirkt.

Deswegen lassen sich Talk-Einkristalle in Protoenstatit umwandeln, wobei das Umwandlungsprodukt eine definierte Orientierung zum Talk-Einkristall aufweist.

Die Art der Umwandlung ist sicherlich durch die Beziehungen zwischen den Strukturen von Talk und Protoenstatit bestimmt. Deswegen setzt eine Klärung des Umwandlungsmechanismus eine genaue Kenntnis beider Strukturen voraus.

Weil in der Literatur über beide Strukturen widersprüchliche Angaben vorlagen, war für die Behandlung des Themas, nämlich den Umwandlungsmechanismus möglichst weit zu klären, eine Neubestimmung beider Strukturen erforderlich.

Bisherige Untersuchungen über TALK

Im Jahre 1930 verwies PAULING in einer Arbeit über Glimmer auf die Verwandschaft des Talkes mit Pyrophyllit. J. W. GRUNER (1934) führte die erste röntgenographische Strukturuntersuchung durch, als Untersuchungsmaterial lagen Talker von Harford County (Maryland) und Vorwald (Steiermark) vor. Die zwei verschiedenen Proben waren auf Grund von Pulver-Aufnahmen nicht zu unterscheiden, sie erschienen als monoklin. Die Strukturaufklärung wurde mit Hilfe von Debye-Scherrer-Aufnahmen durchgeführt. Raumgruppe und Gitterkonstanten sind in Tabelle (1) angegeben, die Struktur-Parameter in Tabelle (2). Danach ist die Struktur des Talkes aufgebaut aus Schichten der Zusammensetzung $\text{Mg}_3 [(\text{OH})_2\text{Si}_4\text{O}_{10}]$, die parallel (001) liegen. Jede einzelne Schicht besteht aus Mg-Netzen mit oktaedrischer (O, OH)-Umgebung, die zwischen zwei SiO_4 -Tetraedernetzen liegen. Auf Grund geometrischer Überlegungen sind Strukturmodelle für die Raumgruppen $C_{2/m}$ und $C_{2/c}$ berechnet. Bessere Übereinstimmung wurde für $C_{2/c}$ erhalten.

STERLING B. HENDRICKS unternimmt 1938 erneut eine Struktur-Aufklärung des Talkes mit Einkristall-Aufnahmen. Verwendet wurde Material vom gleichen Fundort wie bei J. W. GRUNER von Harford County (Maryland). Gitterkonstanten und Raumgruppe sind in Tabelle (1) angegeben.

Die Struktur wurde mit Hilfe von Weissenberg-Aufnahmen um $[010]$ bearbeitet. Die in der Arbeit abgebildeten Aufnahmen zeigen stark verbreiterte Reflexe und zeugen für einen aufgeblättern Kristall, es ist kaum möglich, eventuelle kleine Abweichungen von monokliner Symmetrie festzustellen.

Es wurden vom Autor verschiedene (OH)-Anordnungen diskutiert, die eine oktaedrische Umgebung für das Mg ergeben. Da kein Vorschlag eine gute Übereinstimmung zwischen beobachteten und gemessenen Intensitäten ergibt, kommt HENDRICKS zu dem Schluß, daß die wirkliche Struktur aus einer statistischen Übereinanderlagerung

der Schichten längs der b-Achse gebildet wird. Die Verschiebung längs der b-Achse beträgt 0, $1/2$, $1/4$, und $1/3$. Die meisten Schichten haben jedoch die gleiche Lagerung zueinander wie zwei Schichten in der Raumgruppe Cc. Parameter für diese Struktur sind in Tabelle (3) angegeben.

(1966) berichten J. H. RAYNER und G. BROWN in einer Kurzveröffentlichung über eine triklin Struktur von Talk. Verwendet wurde das gleiche Material wie von S. B. HENDRICKS. Von mehreren untersuchten Kristallen ist keiner mit monokliner Symmetrie gefunden worden. Die Gitterkonstanten, bezogen auf eine pseudomonokline Zelle, sind in Tabelle (1) ausgeführt. Die Struktur wurde mit Hilfe geometrischer Überlegungen gelöst. Der R-Wert beträgt 14,1 %, verwendet wurden Weissenberg-Aufnahmen. Insgesamt wurden 384 Reflexe gemessen, sie lagen in den Schichten (0kl), (1kl) und (2kl). Die Parameter sind in Tabelle (4) angegeben.

M. ROSS, W. L. SMITH und W. H. ASHTON berichten 1968 ebenfalls über triklinen Talk, ohne auf strukturelle Fragen einzugehen. Die Gitterkonstanten sind aus Tabelle (1) zu ersehen.

Die zwei zuletzt genannten Arbeiten wurden erst bekannt, nachdem die eigenen Untersuchungen ziemlich fortgeschritten waren.

Tabelle (1). Die kristallographischen Daten von Talk.

$a_o \text{ \AA}$	$b_o \text{ \AA}$	$c_o \text{ \AA}$	αGrd	βGrd	γGrd	Raumgruppe	Literatur
5.26	9.10	18.81		100.00		C2/c	J.W.GRUNER
5.27	9.13	18.88		100.25		Cc	ST.B.HENDRICKS
5.293	9.179	9.463	90.58	98.91	90.03	C $\bar{1}$	J.H.RAYNER, G.BROWN
5.255	9.137	9.448	90.75	98.75	90.00	C $\bar{1}$	M.ROSS, W.L. SMITH, W.H.ASHTON.

Tabelle (3). Strukturparameter nach St. B. Hendricks.

ATOM	X	Y	Z	ATOM	X	Y	Z
Mg	0.000	0.666	0.000	O	-0.250	0.583	-0.176
Mg	0.000	0.000	0.000	O	0.525	0.750	0.176
Mg	0.000	0.333	0.000	O	-0.525	0.583	-0.176
(OH)	0.203	0.500	0.058	O	0.275	0.000	0.176
(OH)	-0.203	0.833	-0.058	O	-0.275	0.333	-0.176
O	0.203	0.833	0.058	Si	0.261	0.833	0.143
O	-0.203	0.500	-0.058	Si	-0.261	0.500	-0.143
O	0.203	0.166	0.058	Si	0.761	0.666	0.143
O	-0.203	0.166	-0.058	Si	-0.761	0.666	-0.143
O	0.025	0.750	0.176				

Tabelle (2). Strukturparameter nach J. W. Gruner.

ATOM	X	Y	Z	ATOM	X	Y	Z
Mg	0.000	0.000	0.000	O	0.475	0.083	0.323
Mg	0.000	0.333	0.000	O	-0.275	0.333	0.323
Mg	0.000	-0.333	0.000	O	-0.202	0.500	0.441
O	0.202	0.500	0.058	O	-0.202	0.166	0.441
O	0.202	0.166	0.058	OH	-0.202	-0.166	0.441
OH	0.202	-0.166	0.058	Si	-0.239	0.000	0.143
O	0.025	0.083	0.176	Si	0.261	0.166	0.143
O	-0.475	0.083	0.176	Si	0.239	0.000	0.357
O	0.275	0.333	0.176	Si	-0.261	0.166	0.357
O	-0.025	0.083	0.323				

Tabelle (4). Strukturparameter nach J. H. Rayner, G. Brown.

ATOM	X	Y	Z	ATOM	X	Y	Z
Mg	0.000	0.000	0.000	O	0.7016	0.0014	0.1171
Mg	0.9995	0.3329	0.000	O	0.7022	0.3356	0.1190
Si	0.7471	0.0030	0.2910	O	0.7442	0.1699	0.3484
Si	0.7480	0.3366	0.2920	O	0.5225	0.4293	0.3479
O(OH)	0.1981	0.1673	0.1130	O	0.0209	0.4122	0.3490

Bisherige Untersuchungen über Protoenstatit

HARALDSEN stellte 1930 fest, daß durch die thermische Zersetzung des Talkes (von etwa 900°C an) eine neue Pyroxen-Phase entsteht mit einem Röntgendiagramm, welches sich deutlich von denjenigen des Orthoenstatits und Klinoenstatits unterscheidet. Die Synthese dieser Phase gelang ihm auch aus den Oxiden MgO , SiO_2 durch Erhitzen auf $1300^{\circ} - 1400^{\circ}\text{C}$.

1937 fand THILO, daß ab 935°C in Röntgenaufnahmen Linien auftreten, die weder dem Orthoenstatit noch dem Klinoenstatit zugeordnet werden können. Er nennt die neue Phase Metatalk.

1938 stellten W. BÜSSEM, C. SCHUSTERIUS und K. STUCKARDT fest, daß Steatit (Keramisches Produkt auf Talkbasis (Speckstein)) als wichtigsten Bestandteil Protoenstatit (Metatalk, MgSiO_3) enthält, der durch den glasigen Anteil des Steatits stabilisiert wird.

(1951) befaßte sich L. ATLAS mit dem Polymorphismus von MgSiO_3 und entwarf eine hypothetische Struktur für Protoenstatit mit der Raumgruppe $\text{Pbc}2_1$. Angegeben sind weder genaue Parameter noch berechnete und gemessene Intensitäten. Der Protoenstatit wurde durch Erhitzen von Anthophyllit auf 1250°C für 16 Stunden erhalten.

(1951) befaßte sich W. LINDEMANN mit der Protoenstatit-Struktur. Durch thermische Zersetzung von Talk sowie Oxydmischungen MgO-SiO_2 wurde der Protoenstatit in polykristalliner Form erhalten. Die Struktur-Untersuchungen waren mit Hilfe von Pulveraufnahmen durchgeführt worden. Nach seiner Auffassung besteht große Ähnlichkeit zwischen dem Protoenstatit und dem von ihm gleichfalls angegangenen Klinoenstatit (siehe Tabelle (5)), wie ein Vergleich der von ihm angegebenen Gitterkonstanten und Parameter der zwei Strukturen zeigt.

(1955) befaßte sich LINDEMANN mit dem Umwandlungsmechanismus von Talk zu Protoenstatit-Einkristallen. Als Untersuchungsmaterial lagen Talk vom Sudan und Greiner sowie Steatit aus Göpfersgrün vor. Ohne auf die Symmetrie des Protoenstatits einzugehen, wurde die Optik der

in Protoenstatit umgewandelten Talkplättchen genau beschrieben. Die Umwandlung soll nach folgendem Schema erfolgen: Die Talkplättchen reißen nach den OH-Gruppen auf. Es treten 2 OH-Gruppen zu einem H_2O zusammen und das O^{2-} -Ion tritt dort ein, wo eine Si-O-Si-Brücke aufgesprengt wird. Die Frage mit den Mg-Lagen und der zu 1/4 freierwerdenden Kieselsäure wurde nicht diskutiert.

(1959) befaßte sich J. V. SMITH mit der Protoenstatit-Struktur. Die Struktur wurde mit Protoenstatit-Pulver aufgeklärt. Als Ausgangsmaterial diente $MgSiO_3$ -Glas, welches unter hydrothermalen Bedingungen kristallisiert wurde. ($1080^\circ C$, 500 bar H_2O , 4 Tage).

J.V. SMITH fand auf Grund seiner Röntgen-Aufnahmen rhombische Symmetrie mit der Raumgruppe Pbcn. Bei der Indizierung seiner Aufnahmen findet er verbotene Reflexe für Pbcn wie z. B. (210), deren d-Werte wohl innerhalb der Meßgenauigkeit mit erlaubten Reflexen zusammenfallen.

(1961) teilt LINDEMANN in einer Kurzveröffentlichung die Parameter für eine Protoenstatit-Struktur mit, diese ist von der im Jahre (1951) angegebenen verschieden. Nimmt man jedoch an, daß der angegebene Wert für β eigentlich $180-\beta$ ist, so zeigt schon ein Vergleich der Koordinaten, daß auch hier im wesentlichen die von ihm postulierte Klinoenstatitstruktur gefordert wird. Läßt man die Interatomaren Abstände der zwei Strukturen mit den angegebenen Strukturparametern berechnen, so ergibt sich eine zu große Streuung der Si-O- sowie der Mg-O-Abstände. Er gibt die Brechungsindices des Protoenstatits an und weist besonders auf die schiefe Auslöschung // $[010]$ als Beweis für die Monoklinität hin. Fo- und Fc-Werte sind in dieser Arbeit sowie in späteren nicht angegeben. K. V. GEHLEN untersuchte (1962) die orientierte Umwandlung von Talk in Protoenstatit in gebrannten Preßkörpern von Speckstein. Er deutet seine Ergebnisse als Beweis für die Richtigkeit der von W. LINDEMANN postulierten Struktur.

W. L. BROWN und J. V. SMITH untersuchten (1963) $MgSiO_3$ -Einkristalle (vom Norton-Meteorit) mit Hilfe einer Hochtemperatur-Präzessionskamera und erhielten zwischen $1050 \pm 50^\circ$ und $1300^\circ C$ Protoenstatit-

Aufnahmen. Als Raumgruppe ergibt sich wie in der Arbeit von J. V. SMITH Pbcn.

Eine Zusammenstellung der Raumgruppen der Gitterkonstanten und der Koordinanten der oben genannten Autoren findet man in Tabelle (6).

Tabelle (6). Gitterkonstanten und Parameter für Protoenstatit nach J. V. Smith (1959)

$a_o = 9.25 \text{ \AA}$ $b_o = 8.74 \text{ \AA}$ $c_o = 5.32 \text{ \AA}$ Raumgruppe: Pbcn $Z=8$.

	X	Y	Z		X	Y	Z
Mg	0.000	0.265	0.250	Mg	0.000	-0.087	0.250
Si	0.292	0.091	0.07	O	0.118	0.097	0.07
O	0.359	0.259	0.07	O	0.348	0.000	0.32

Gitterkonstanten und Raumgruppe für Protoenstatit nach L. Atlas (1951)

$a_o = 9.25 \text{ \AA}$ $b_o = 8.92 \text{ \AA}$ $c_o = 5.25 \text{ \AA}$ Raumgruppe: Pbc2

Tabelle (5). Struktur-Vorschlag für Protoenstatit nach W. LINDEMANN (1951).

Die Parameter für Klinoenstatit sind aus der Diopsid-Struktur hergeleitet.

KLINENSTATIT MgSiO_3
Raumgruppe: $C2/c$

$$a_o = 9.70 \text{ \AA} \quad b_o = 8.89 \text{ \AA}$$

$$c_o = 5.24 \text{ \AA} \quad \beta = 105^\circ 50' \quad Z = 8$$

PROTOENSTATIT MgSiO_3
Raumgruppe: $P2_1/n$

$$a_o = 9.70 \text{ \AA} \quad b_o = 8.89 \text{ \AA}$$

$$c_o = 5.24 \text{ \AA} \quad \beta = 105^\circ 50' \quad Z = 8$$

	X	Y	Z	Punktsymmetrie
4 Mg in (e)	0.00	-0.30	0.25	2
4 Mg in (e)	0.00	0.09	0.25	2
8 Si in (f)	0.21	0.41	0.24	1
	0.71	0.91	0.24	1
8 O in (f)	0.38	0.42	0.14	1
	0.88	0.92	0.14	1
8 O in (f)	0.14	0.25	0.32	1
	0.64	0.75	0.32	1
8 O in (f)	0.14	0.50	0.00	1
	0.64	0.00	0.00	1

	X	Y	Z	Punktsymmetrie
4 Mg in (e)	0.00	-0.30	0.125	1
4 Mg in (e)	0.00	0.09	0.25	1
4 Si in (e)	0.21	0.41	0.24	1
4 Si in (e)	0.71	0.91	0.24	1
4 O in (e)	0.38	0.42	0.14	1
4 O in (e)	0.88	0.92	0.14	1
4 O in (e)	0.14	0.25	0.32	1
4 O in (e)	0.64	0.75	0.32	1
4 O in (e)	0.14	0.50	0.00	1
4 O in (e)	0.64	0.00	0.00	1

Tabelle (5a). PROTOENSTATIT. LINDEMANN (1961)

$$\text{Raumgruppe: } P2_1/n \quad a_o = 9.681 \text{ \AA} \quad b_o = 8.739 \text{ \AA} \quad c_o = 5.202 \text{ \AA} \quad \beta = 71^\circ 55'$$

	X	Y	Z	P.S.
4 Mg in (e)	0.000	-0.310	0.200	1
4 Mg in (e)	0.000	0.091	0.250	1
4 Si in (e)	-0.210	0.410	0.299	1
4 Si in (e)	0.210	0.410	0.201	1
4 O in (e)	-0.400	0.420	0.400	1

	X	Y	Z	P.S.
4 O in (e)	0.400	0.420	0.100	1
4 O in (e)	-0.138	0.250	0.159	1
4 O in (e)	0.138	0.250	0.341	1
4 O in (e)	-0.150	0.490	0.550	1
4 O in (e)	-0.150	0.490	0.950	1

Strukturbestimmung und Verfeinerung am TALK

Experimentelles: Als erstes wurde die Neubestimmung der Struktur des Talks in Angriff genommen. Als Untersuchungsmaterial lagen große Talk-Spaltstücke von ca. 5 cm Länge und 2 cm Dicke, aus Zillertal/Österreich und Grießer Hof/Friesach, Kärnten/Österreich vor.

Die chemische Analyse der ersten Probe ergab folgende Zusammensetzung:

gefunden			berechnet nach Formel
SiO ₂	:	62.7 %	63.35 %
MgO	:	30.9 %	31.90 %
H ₂ O	:	4.8 %	4.74 %
Al ₂ O ₃	:	0.13 %	-
Fe ₂ O ₃	:	1.4 % (FeO : 1.26)	-
CaO	:	0.05 %	-
Na ₂ O	:	0.06 %	-
K ₂ O	:	0.02 %	-
H ₂ O ⁻	:	0.03 %	-

(Die chemische Analyse wurde auf Veranlassung von Herrn Priv.-Doz. Dr. K. H. SCHÜLLER im Zentral-Laboratorium der Firma "Steatit Magnesia AG" Lauf durchgeführt.)

Die untersuchten Talk-Proben sind von hellgrüner Farbe, der optische Befund ergibt keine Inhomogenitäten des Kristalls. Die Präparation der untersuchten Kristalle erfolgt folgendermaßen: Durch Brechen eines großen Talkspaltstückes mit der Hand entstehen kleine Spaltstücke von geeigneter Korngröße für eine Einkristall-Aufnahme. Das Auslesen dieser kleinen Spaltstücke erfolgt unter dem Stereo-Mikroskop,

wobei nach Kristallen gesucht wird, die optisch keine Aufblätterung der Basisfläche (001) zeigen. Das ist der Fall meistens für Korngrößen kleiner 0,1 mm.

Insgesamt wurden um die 30 Kristalle untersucht. Dabei wurden oft Aufnahmen erhalten, die wie bei den Abbildungen von St. Hendricks starke Reflexverbreiterung zeigen. Sie sind durch eine feine Aufblätterung parallel zu (001) zu erklären. Meistens sind jedoch Aufnahmen erhalten worden, die einen gut geordneten Kristall zeigen. Die Kristalljustierung kann schnell auf folgende Weise vorgenommen werden: Auf dem Zweikreisgoniometer wird der Kristall mit Hilfe der Basisfläche (001) so justiert, daß das Talkplättchen parallel zur mechanischen Achse des Goniometerkopfes und einer Schlittenebene liegt. Mit dieser Vorjustierung genügen meistens zwei Schwenkaufnahmen, um den Kristall röntgenographisch zu justieren, da sich in der Ebene durch Kippung des Schlittens die Richtungen $[100]$, $[010]$, oder $[110]$ als Drehachse einstellen lassen.

Für die Röntgen-Einkristallaufnahmen wurden eine Präzessionskamera, eine integrierende Weissenberg-Kamera sowie eine Straumanis-Weissenberg-Kamera mit doppeltem Radius (ϕ 114,6 mm) zur genauen Gitterkonstanten-Bestimmung eingesetzt.

Die meisten Kristalle wurden um $[010]$ oder $[110]$ justiert. Der Kristall wurde zuerst als monoklin angesehen. Bei dem Versuch die Raumgruppe zu bestimmen, sind folgende Auslöschungen gefunden worden:

(hkl)	nur mit $h + k = 2n$ vorhanden
$(h0l)$	" " $h = 2n$ "
$(0k0)$	" " $k = 2n$ "
$(0kl)$	" " $k = 2n$ "
$(hk0)$	" " $h + k = 2n$ "

Man kommt auf Grund dieser Auslöschungen zu den möglichen Raumgruppen $C_{2/m}$, C_2 oder C_m .

Für die Raumgruppe $C_{2/c}$ sollten $(h0l)$ -Reflexe nur mit h und l gerade

wegen der c-Gleitung auftreten, in höheren Schichtlinien dagegen müßten (hkl) mit l ungerade vorkommen. Vergleicht man die nullte und die zweite Schicht um $[010]$, also Reflexe (h0l) und (h2l) (Abb. (1,2)), dann sollten die Kurvenscharen in der zweiten Schicht doppelt so dicht besetzt sein. Wie man sieht, ist das nicht der Fall, es ist also keine c-Gleitung vorhanden; als unmittelbare Folge muß die Co-Gitterkonstante von ST. HENDRICKS und J. W. GRUNER halbiert werden. Die Aufnahmen zeigen weiter die Qualität des für die Strukturaufklärung verwendeten Kristalls, es handelt sich ohne Zweifel um ein gut geordnetes Exemplar.

Für die weitere Symmetrie-Diskussion betrachtet man die (02l)-Reflexe der zweiten Schicht. Für monokline Symmetrie sollte $I(02l)=I(02\bar{l})$ sein, denn im monoklinen Fall gilt $I_{hkl}=I_{h\bar{k}l}=I_{hkl}=I_{h\bar{k}l}$
 $=I_{hkl}=I_{h\bar{k}l}$ ferner $I_{hkl}=I_{h\bar{k}l}=I_{h\bar{k}l}=I_{h\bar{k}l}$.

Wie man auf Grund der (02l)-Reflexe feststellt, ist diese Bedingung nicht erfüllt. Der Kristall ist also als pseudomonoklin zu betrachten.

Abb. (3) zeigt eine Präzessionsaufnahme der (0kl)-Ebene des reziproken Gitters. Da im monoklinen Fall die (0kl)-Reflexe einen rhombischen Schnitt bilden, muß die Aufnahme die Symmetrie 2 mm aufweisen. Die markierten Stellen zeigen jedoch deutliche Abweichungen.

Da die Präzessions-Aufnahmen unverzerrte Abbildungen des reziproken Gitters sind, kann der Winkel α^* in der (0kl)-Ebene genau bestimmt werden. Es ergibt sich $\alpha^*=89,2^\circ$, also eine deutliche Abweichung von 90° . Die Bestimmung des Winkels γ^* aus (hk0)-Aufnahmen mit der Präzessionskamera ergibt $\gamma^*=89,8^\circ$.

Die genaue Gitterkonstanten-Bestimmung aus Präzessions- sowie Rückstrahlweissenberg-Aufnahmen führt auf folgende Endwerte:

$$\begin{array}{ll} a_o = 5,290(2) \text{ \AA} & \alpha = 90,80^\circ(2) \\ b_o = 9,171(2) \text{ \AA} & \beta = 98,90^\circ(2) \\ c_o = 9,470(3) \text{ \AA} & \gamma = 89,90^\circ(2) \end{array}$$

Daraus folgt für die Anzahl der Moleküle in der Elementarzelle:

$z=2$, als Volumen ergibt sich $V=553 \text{ \AA}^3$, als Raumgruppe folgt C_1 oder C_1 .

Für die Strukturbestimmung wird die C-Aufstellung beibehalten, später jedoch wird durch eine Basistransformation auf die reduzierte Zelle übergegangen.

Zur Intensitätsbestimmung wurde die Multiple-Film-Methode angewandt. Fünf Filme für jede Schicht wurden mit einer integrierenden Weissenberg-Kamera aufgenommen. Es wurde immer auf konstante Belichtungszeit und abgeschlossene Integrationszyklen geachtet. Die nach der Multiple-Film-Methode belichteten fünf Filme wurden gemeinsam entwickelt und fixiert, die entsprechenden Zeiten wurden für alle Film-Serien konstant gehalten. Es wurden insgesamt acht Schichtlinien um $[010]$ aufgenommen. Die Angleichung, der um $[010]$ aufgenommenen Schichten erfolgt durch Aufnahmen des gleichen Kristalls um $[\bar{1}\bar{1}0]$. Die $[\bar{1}\bar{1}0]$ -Richtung bildet einen Winkel von 30° mit der $[0\bar{1}0]$ -Richtung. Durch Kippung um 30° , des zu dem Talkplättchen parallel stehenden Schlitters hat man automatisch die $[\bar{1}\bar{1}0]$ -Richtung als Drehachse. Es soll kurz gezeigt werden, wie die pseudomonokline Indizierung der Weissenberg-Aufnahmen erfolgt.

Man denke sich eine neue Basis $\vec{a}'$, $\vec{b}'$, $\vec{c}'$, die in folgender Beziehung zu der alten Basiszentrierten Zelle steht. Abb. (4)

$$\vec{a}' = \vec{a}$$

$$\vec{b}' = \frac{-\vec{a}-\vec{b}}{2}$$

$$\vec{c}' = \vec{c}$$

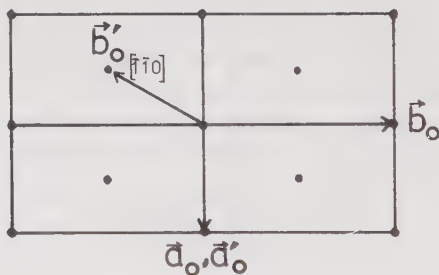


Abb. 4.

Nun gilt das gleiche Transformationsverfahren für die Koordinaten des reziproken Gitters; daraus folgt:

$$h' = h$$

$$k' = \frac{-h-k}{2} \quad h', k', l' \text{ ist die Indizierung bezogen auf der neuen Basis.}$$

$$l' = l$$

Betrachten wir die nullte Schicht um $\vec{b}^*(\bar{1}\bar{1}0)$, dann ist

$$k' = 0; \text{ aus } k' = \frac{-h-k}{2} = 0 \text{ folgt } -h = k$$

das heißt, es sind folgende Reflexe auf der nullten Schicht zu erwarten: $\bar{1}11, \bar{2}21, \bar{3}31, \dots$ (C-Indizierung).

Für die erste Schicht um $\vec{b}^*(\bar{1}\bar{1}0)$ mit $k' = 1$ gilt entsprechend

$$k' = \frac{-h-k}{2} = 1; \text{ daraus folgt } k + h = -2.$$

Es treten folgende Reflexe auf: $\bar{2}01, \bar{1}11, 0\bar{2}1, 1\bar{3}1, 2\bar{4}1, 3\bar{5}1, 4\bar{6}1, 5\bar{7}1.$

Sämtliche Filme wurden mit Hilfe eines Photometers vermessen.

Insgesamt wurden um die 100 Filme photometriert. Die Intensitäten wurden hinsichtlich des Lorenz- und Polarisations-Faktors korrigiert.

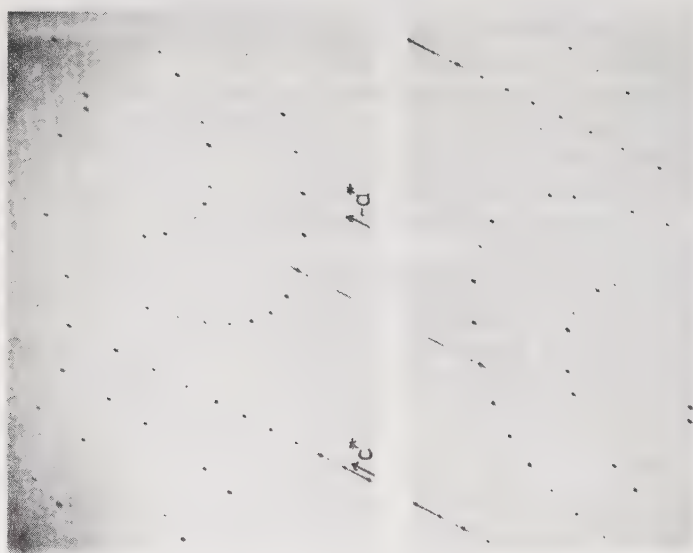
Da viele Reflexe auf mehreren Filmen innerhalb des linearen Schwärzungsbereichs des Röntgenfilmes liegen, lassen sich die Abschwächungsfaktoren der einzelnen Filme ermitteln und alle Reflexe auf den am stärksten belichteten Film beziehen.

Für die Struktur-Bestimmung wurden insgesamt 752 symmetrisch verschiedene Reflexe gemessen. Verwendet wurde $\text{CuK}\alpha$ -Strahlung mit Ni-Filter, 40 KV, 20 mA.

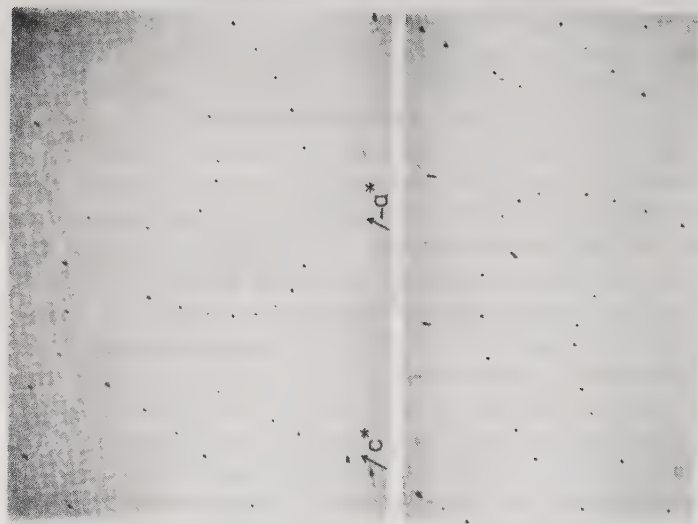
Der für die Struktur verwendete Kristall hatte die Form eines fast rhombischen Prismas mit folgenden Abmessungen. Länge: 0,35 mm

Breite: 0,2 mm, Dicke: 0,05 mm.

Auffallend bei den gemessenen Intensitäten ist, daß die Schichten mit $k = 3n$ ($n = 0, 1, 2 \dots$) besonders stark sind, während die übrigen Schichten schwach kommen.



h0l



h2l

Abb. (1, 2). Weissenberg-Aufnahmen vom TALK (1)

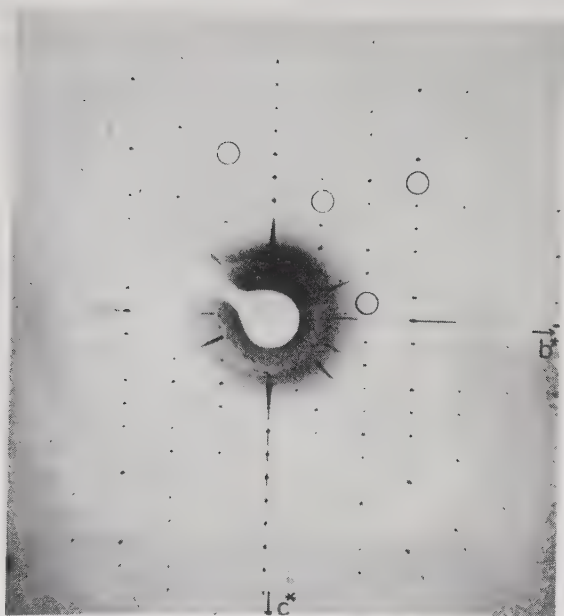


Abb. (3). Präzessionsaufnahme vom TALK (1). Präzessionsachse: $[100]$
 Mo, $K\alpha$ -Strahlung. $\mu = 30^\circ$; 10 Stunden.

Strukturbestimmung

Die Strukturbestimmung wurde auf zwei verschiedenen Wegen versucht: Erstens mit Hilfe der Patterson-Funktion, zweitens nach direkten Methoden.

a. Patterson-Funktion

Mit Hilfe der 752 gemessenen Reflexen wurde eine dreidimensionale Patterson-Synthese gerechnet. In der Raumgruppe C_7 treten Harker-maxima mit doppeltem Gewicht, Nicht-Harkermaxima mit dem vierfachen Gewicht auf. Tabelle (7) gibt die für die Raumgruppe C_7 auftretenden Beziehungen zwischen Pattersonkoordinaten und Strukturparametern wieder. Eine direkte Interpretation der Patterson-Funktion ist sehr schwierig, erstens durch die niedrige Symmetrie und zweitens durch die kleinen Streuunterschiede zwischen den in der Struktur auftretenden Atomen, Silizium und Magnesium, Abbruchseffekte und Überlappung als Folge rationaler Abhängigkeit der Parameter erschweren die Deutung der Funktion. Es wurde versucht, die Patterson-Synthese mit Hilfe der Superpositionsmethode zu deuten. Die Patterson-Funktion stellt eine Faltung der Struktur mit sich selbst dar, die Superposition entfaltet das Pattersonbild, um das richtige Strukturbild zu erhalten. Um die Methode erfolgreich durchzuführen, muß folgendes erfüllt sein: Man lokalisiert einen einfachen Vektor im Pattersonbild, z. B. ein einfaches $2\vec{r}_i$ Harkermaximum ($2\vec{r}_i = 2x, 2y, 2z$), wenn man eine zentrosymmetrische Raumgruppe hat. Durch Überschieben zweier Pattersonbilder um den gewählten Vektor und Betrachtung der durch die Überschiebung aufeinanderfallenden Maxima erhält man das richtige Strukturbild. Der Nullpunkt befindet sich dann auf der Mitte des Überschiebungs-Vektors. Das Verfahren führt immer zum Erfolg, wenn man ein einfaches Maximum als solches erkennt. Beim Talk führte das Verfahren zu keinem Erfolg, da das gewählte Überschiebungsmaximum sich als Nicht-Harker-Maximum erwies.

Man kann leicht die Schicht-Struktur des Talkes im Patterson-Bild erkennen; es wurde jedoch auf geometrische Überlegungen ver-

zichtet und als nächstes die direkte Methode angewendet.

b. Direkte Methode

Es soll an dieser Stelle nicht die direkte Methode beschrieben werden, eine zusammenfassende Darstellung der Methode findet man in den Arbeiten von H. BURZLAFF (1968) und R. BÖHME (1970).

Bei der Berechnung der Stützpunkte der K-Kurve ergab sich eine so große Streuung der K-Werte, daß sich kaum eine glatte Kurve hindurchlegen ließ. Die E-Normierung mit der bestangepassten Kurve ergab einen Wert von $\langle |E|^2 \rangle \approx 1,3$ also eine Abweichung von 30 % von dem nach Definition auf $\langle |E|^2 \rangle = 1$ gesetzten Wert. Nach dieser Feststellung wurde die E-Normierung mit einer korrigierten K-Kurve durchgeführt. $\langle |E|^2 \rangle$ ergab sich gleich 1,05. Tabelle (8) gibt die verschiedenen Mittelwerte von E für den zentrischen wie azentrischen Fall sowie für den Talk an.

Tabelle (8)

Struktur	$\langle E \rangle$	$\langle E ^2 \rangle$	$\langle E ^2 - 1 \rangle$	$\langle E ^3 \rangle$	$\langle E ^4 \rangle$
zentrisch	0,798	1,0	0,986	1,594	ca. 3
azentrisch	0,886	1,0	0,736	1,350	ca. 2
gefunden	0,791	1,05	1,085	1,966	4,52

Die berechneten Werte liegen näher den zentrosymmetrischen, deswegen wurde die Raumgruppe C_{2v} als richtig angesehen und die direkte Methode für den zentrosymmetrischen Fall angewandt.

Die Verteilung der E-Werte ist in folgender Tabelle wiedergegeben:

E-Werte	Anzahl der Reflexe
$0 \leq E < 0,3$	156
$0,3 \leq E < 0,8$	310
$0,8 \leq E < 1,2$	141
$1,2 \leq E < 1,6$	62
$1,6 \leq E < 2,1$	40
$2,1 \leq E < 2,5$	23
$2,5 \leq E < 3,0$	11
$3,0 \leq E$	9

Zwischen den 83 stärksten E-Werten ($E \geq 2.1$) wurden sämtliche Sayre-Relationen berechnet.

Wegen der C-Zentrierung kommen nicht sämtliche Paritätsklassen vor, sondern nur vier, nämlich HKL der Art GGG, GGU, UUG, UUU.

Zur Festlegung des Nullpunktes wurde wie folgt verfahren:

Durch Transformation auf die reduzierte triklone Zelle bekommt man hkl sämtlicher Paritätsklassen. Man wählt drei linear unabhängige Reflexe mit möglichst großen E-Werten und vielen Findungen bei den Sayre-Relationen und transformiert wieder auf die C-Zelle. Es würden folgende Reflexe gewählt:

H	K	L	Vorzeichen	E	Findungen in Sayre-Relationen
1	3	-6	+1	2,90	30
3	3	-1	+1	3,21	31
-2	6	-5	+1	3,01	19

Mit Hilfe zweier symbolischer Vorzeichen (a,b) wurden nach dem "Symbolischen Additionsverfahren" weitere Vorzeichen bestimmt. Nachdem ca. 100 Reflexe mit Vorzeichen versehen waren, wurde das HKL-Deck um kleinere E-Werte erweitert.

Durch die zwei symbolischen Vorzeichen erhält man folgende drei Vorzeichenkombinationen: 1) A = +1, B = -1; 2) A = -1, B = +1; 3) A = -1, B = -1. Mit Hilfe des erweiterten Datensatzes werden durch die Sayre-Formel weitere Vorzeichen bestimmt, und man erhält drei verschiedene Lösungen entsprechend den drei Vorzeichenkombinationen. Insgesamt wurden um die 250 bis 300 Vorzeichen bestimmt. Es wurden drei verschiedene Fourier-Synthesen gerechnet entsprechend den drei Vorzeichenkombinationen; eine von ihnen enthielt richtige Strukturteile, mit denen sich nach einer Strukturfaktorrechnung eine weitere Fourier-Synthese berechnen ließ, in der die Struktur vollkommen zu erkennen war. Die gefundene Struktur ist identisch mit der von J. H. RAYNER und G. BROWN (1966).

Es ist zu bemerken, daß die meisten Reflexe, denen das Vorzeichen bestimmt wurde, infolge der rationalen Abhängigkeit, $k = 3n$ besitzen. Die Ursache für die Bevorzugung der Reflexe mit $k = 3n$ liegt darin, daß die meisten Atome y -Parameter besitzen, die das Vielfache von $1/6$ sind.

Interessant ist, daß trotz verschiedener Meßfehler, die später erläutert werden, die direkten Methoden zum richtigen Strukturbild geführt haben.

Tabelle (7)

HARKER-MAXIMA

Gew.

NICHT-HARKER-MAXIMA

$2x \ 2y \ 2z$

$2x$

$u \ v \ w$

$4x$

$1/2+2x \ 1/2+2y \ 2z$

$2x$

$u'' \ v'' \ w''$

$4x$

$1/2-2x \ 1/2-2y \ -2z$

$2x$

$-u \ -v \ -w$

$4x$

$-2x \ -2y \ -2z$

$2x$

$-u'' \ -v'' \ -w''$

$4x$

$1/2 \ 1/2 \ 0$

$2x$

$1/2+u \ 1/2+v \ w$

$4x$

$-1/2 \ -1/2 \ 0$

$2x$

$1/2+u'' \ 1/2+v'' \ w''$

$4x$

$1/2-u \ 1/2-v \ -w$

$4x$

$1/2-u \ 1/2-v \ -w$

$4x$

$u = X_1 - X_2, \ v = Y_1 - Y_2, \ w = Z_1 - Z_2$

$u'' = X_1 + X_2, \ v'' = Y_1 + Y_2, \ w'' = Z_1 + Z_2$

Strukturverfeinerung

Zur Strukturverfeinerung wurde ein von Frau Dr. BÖHME an die hiesige Rechenanlage angepaßtes "Least squares" Programm in USASI-FORTRAN benützt. Als Vorlage dazu diente das Programm von BUSING und LEVY. Die Ausgangsparameter wurden aus der Fourier-Synthese entnommen, die das Strukturbild vollständig enthielt.

Die Atome wurden mit individuellen isotropen Temperaturfaktoren versehen. Der R-Wert der verfeinerten Struktur beträgt $R = 14,32 \%$.

Tabelle (9) gibt die Strukturparameter wieder. Die Verfeinerung wurde ohne Absorptionskorrektur durchgeführt.

Während im allgemeinen gute Übereinstimmung zwischen gemessenen und berechneten F-Werten vorhanden ist, gibt es Reflexe, die eine starke Abweichung vorweisen. Eine nachträgliche Korrektur dieser Reflexe auf Grund der mutmaßlichen Fehler bringt einen besseren R-Wert ($R = 10,4 \%$), jedoch keine nennenswerte Beeinflussung der Strukturparameter. Der bessere R-Wert geht hauptsächlich zu Lasten der Temperaturfaktoren.

Versieht man das Ausgangsdeck mit individuellen Skalenfaktoren für jede Schicht, so erreicht man ebenfalls einen besseren R-Wert ($R = 12,5 \%$) ohne Änderung der Struktur. Da sämtliche Schichten an die nullte Schicht angeglichen wurden, wird der schlechtere R-Wert ($R = 14,32 \%$) für die Endkoordinaten angegeben.

Als nächstes sollen kurz die möglichen Fehlerquellen bei der Intensitätsmessung besprochen werden.

Mögliche Fehlerquellen in der Intensitätsbestimmung

Wie schon erwähnt wurde, ist die Struktur mit Filmintensitäten bestimmt worden. Da der Kristall triklin ist, muß der Kristall bei jeder Weissenberg-Aufnahme um 360° gedreht werden, um den entsprechenden Schnitt des reziproken Gitters vollständig zu erhalten. Da der Weissenberg-Film-Zylinder Schwenkungen bis ca. 250° zuläßt, müssen für jede Schicht zwei Aufnahmen gemacht werden und über den gemeinsamen Schwenkbereich die beiden Filme aneinander angeglichen werden, da sie der gleichen Schicht angehören.

Man findet gemeinsame Reflexe an beiden Filmenden längs der Ψ -Achse und man stellt fest, daß die Angleichung verschieden ist, je nachdem ob man sie durch den rechten oder linken Filmrand durchführt.

Absorptionsmessungen an unbelichteten Filmen ergaben, daß die Filmschicht nicht gleichmäßig ist, sondern von der Mitte aus zum Rand zunimmt. Da die Röntgen-Filme im DIN A 4 Format vorliegen, müssen sie für die Weissenberg-Aufnahmen in vier Teile geschnitten werden. Bei der Stapelung der Filme kann es vorkommen, daß während der Aufnahme ehemalige Ränder übereinander fallen, an diesen Stellen tritt eine stärkere Schwächung ein. Dieser Effekt verhindert nicht nur die Angleichung jeder Schicht für sich, sondern fälscht auch den Abschwächungs-Faktor zwischen den simultanaufgenommenen 5 Filmen. Da dieser Effekt erst nach Vorliegen sämtlicher Filme festgestellt wurde, sind die Daten teilweise mit Angleichungsfehlern behaftet.

Da ein nachträgliches Korrigieren der starkabweichenden Reflexe zwar einen besseren R-Wert, jedoch keine anderen Strukturparameter ergab, wurde wegen des Immensen experimentellen Aufwandes auf eine Wiederholung der Aufnahme verzichtet.

Für die ausgeprägte blättrige Form des gemessenen Kristalls dürfte auch die Absorption eine Rolle spielen. Da der Fehler durch das Filmmaterial ungefähr so groß abgeschätzt wurde als der Einfluß der Absorption, wurde keine Absorptionskorrektur durchgeführt.

Tabelle (9). Strukturparameter für TALK I.
Aufstellung C_T.

ATOM	X	Y	Z	B	ATOM	X	Y	Z	B
Si ₁	0.000	0.000	0.000	1.05	Si ₂	0.7457(4)	0.0030(3)	0.2910(2)	1.09
Si ₂	0.9995(4)	0.337(2)	0.0000(2)	1.11	Si ₃	0.7472(3)	0.3350(3)	0.2912(2)	1.13
Si ₃	0.1976(6)	0.1672(8)	0.1117(6)	1.55	Si ₄	0.7422(9)	0.1714(8)	0.3494(6)	1.44
Si ₄	0.5991(9)	0.0011(7)	0.1191(6)	1.43	Si ₅	0.5211(9)	0.4296(7)	0.3487(6)	1.44
Si ₅	0.7005(9)	0.3348(8)	0.1176(6)	1.66	Si ₆	0.0199(9)	0.4122(8)	0.3506(6)	1.52

Eine neue Strukturvariante vom TALK

Wegen der durch das Filmmaterial bedingten Intensitätsfehler wurde im August 1971 versucht, den gleichen Talk-Kristall mit Hilfe eines automatischen Vierkreis-Diffraktometers zu vermessen. Damit sollten genauere Intensitäten erhalten werden, ferner wurde Mo-Strahlung verwendet statt Cu-Strahlung um möglichst den Einfluß der Absorption kleinzuhalten. Bei der Aufstellung der Orientierungsmatrix mit Hilfe der früher ermittelten Gitterkonstanten wurde bald festgestellt, daß die Reflexe schwer zu finden waren, wenn sie überhaupt gefunden wurden; ferner entsprach die Intensitätsabfolge nicht der Abfolge in den Filmen. Um diesen Effekt zu klären, wurden Weissenberg-Aufnahmen um die $[010]$ -Richtung mit Cu-Strahlung gemacht. Ein Vergleich mit den früher gemachten Aufnahmen ergab eindeutig, daß der Kristall sich umgewandelt hatte, denn nicht nur Intensitätsunterschiede waren zu sehen, sondern nach Umzeichnen der Weissenberg-Aufnahmen waren auch metrische Unterschiede deutlich zu erkennen. Während der Winkel α in der ersten Struktur $90,8^\circ$ betrug, war jetzt ein Winkel von ca. 120° festzustellen. c_0 betrug ca. $11 \text{ \AA}$ statt $9,47 \text{ \AA}$. Abb. (56) zeigen Aufnahmen nach der Umwandlung. Die Verfeinerung der Gitterkonstanten wurde mit dem automatischen Diffraktometer durchgeführt, und anschließend wurden die Intensitäten von ca. 2300-Reflexen mit Mo-Strahlung gemessen. Die Verfeinerung der Gitterkonstanten mit dem Diffraktometer ergab folgende Endwerte:

$$\begin{array}{lll} a_0 = 5,291(1) \text{ \AA} & b_0 = 9,172(2) \text{ \AA} & c_0 = 11,155(2) \text{ \AA} \\ \alpha = 121,26^\circ(1) & \beta = 99,67^\circ(1) & \gamma = 89,90^\circ(1) \end{array}$$

Volumen der Elementarzelle $V=453 \text{ \AA}^3$, Anzahl der Moleküle in der Elementarzelle $Z=2$.

Die Intensitätsverschiebungen und die starken metrischen Unterschiede ließen eine neue Strukturvariante des Talkes vermuten, eine Annahme, die sich nach der nachfolgenden Strukturaufklärung bestätigte.

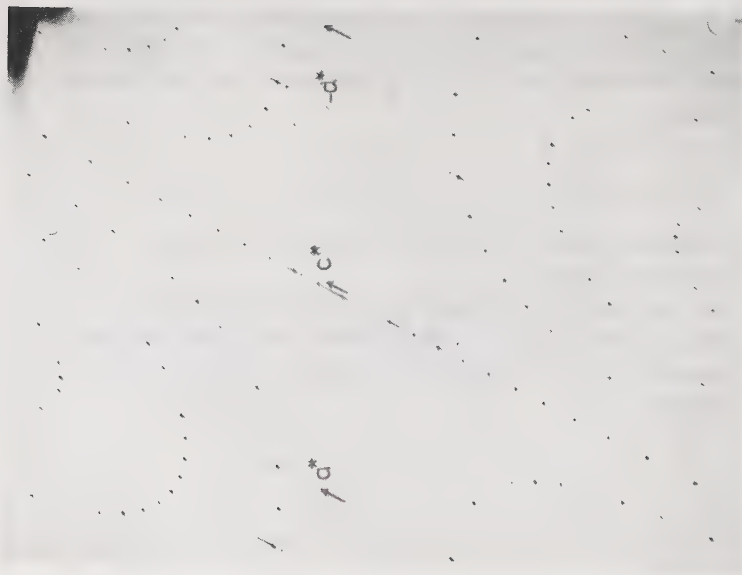


Abb. (5), TALK (11) Weissenberg-Aufnahme (h01) 

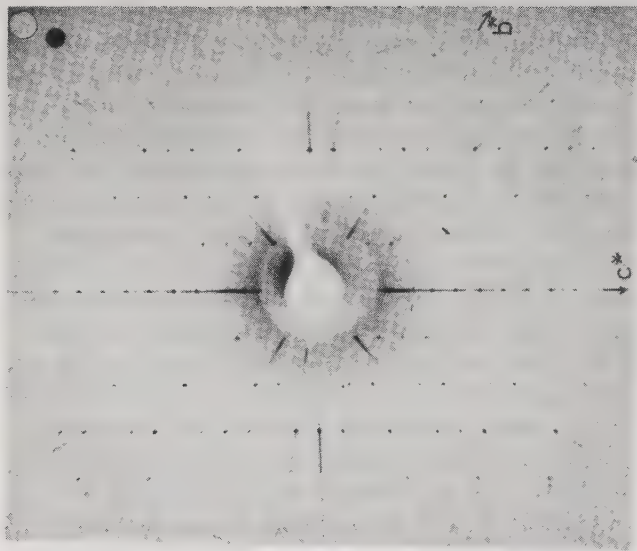


Abb. (6). Präzessionsaufnahme. Präzessionsachse [100]
Mo, $K\alpha$ -Strahlung. $\mu = 30^\circ$; 10 Stunden.

Bis heute ist es nicht geklärt, warum der Kristall in eine zweite Phase sich umwandelte. Es sei nur zu bemerken, daß die Aufnahmen von der ersten Struktur gleich nach der Präparation des Kristalls im Winter 1970 gemacht wurden und die Umwandlung im August 1971 festgestellt wurde. In der dazwischen liegenden Zeit wurde der Kristall auf einem Goniometerkopf im Arbeitszimmer unter Glas aufbewahrt und unterlag keiner mechanischen Beanspruchung.

Im folgenden soll zwischen den zwei Strukturen unterschieden werden und die mit Filmaufnahmen gemachte Struktur als TALK I, die mit dem automatischen Diffraktometer gemessene Struktur als TALK II bezeichnet werden.

Strukturaufklärung von TALK II

Die Struktur von TALK II wurde mit Hilfe der Patterson-Funktion aufgeklärt. Eine dreidimensionale Patterson-Synthese war mit Hilfe der ca. 2300 gemessenen Reflexe berechnet worden.

Das Auflösungsvermögen der Pattersonfunktion war erheblich besser als das Auflösungsvermögen beim TALK I.

Eine erste Interpretation der Funktion ergab, daß die Mg-Lagen im TALK II die gleichen sind wie im TALK I; für die Verteilung der übrigen Maxima ergab es doch Unterschiede, eine Bestätigung der Annahme von einer neuen Struktur. Die Unterschiede der zwei Strukturen müssen also in der Verteilung der Si- bzw. (OH)-Lagen vorliegen. Durch die Fixierung der Si-Lagen sind alle übrigen Strukturparameter festgelegt. Die Parameter der Si-Atome können nach folgenden Überlegungen leicht dem Patterson-Bild entnommen werden. Bekanntlich stellt das Patterson-Bild das Faltungsintegral der Struktur mit sich selbst dar. Da der Nullpunkt der Struktur mit einem Mg-Atom besetzt ist, kann man das Strukturbild aus dem Patterson-Bild isolieren indem man die Umgebung des im Nullpunkt befindlichen Mg-Atoms untersucht. Es wurde der Abstand sämtlicher Maxima von Nullpunkt berechnet. Man findet Maxima im Abstand von $3.2 \text{ \AA}$, die nach dem Abstand sowie dem Gewicht im Patterson-Bild den Si-Atomen entsprechen. Mit den Parametern

Tabelle (10). Strukturparameter für TALK II.
Aufstellung C₁.

ATOM	X	Y	Z	B	ATOM	X	Y	Z	B
Mg ₁	0.000	0.000	0.000	0.39	Si ₁	0.2687(2)	0.3502(1)	0.2910(1)	0.68
Mg ₂	-0.0001(2)	0.3334(1)	0.0000(1)	0.39	Si ₂	0.7687(2)	0.5167(1)	0.2911(1)	0.68
OH ₁	0.7057(5)	0.0707(3)	0.1116(3)	0.70	O ₄	0.2702(6)	0.2193(3)	0.3477(3)	0.87
O ₂	0.2078(5)	0.2412(3)	0.1170(3)	0.60	O ₅	0.0481(5)	0.4798(3)	0.3491(3)	0.86
O ₃	0.7081(5)	0.4069(3)	0.1171(3)	0.60	O ₆	0.5477(5)	0.4603(3)	0.3481(3)	0.85
H	0.242(27)	0.627(17)	0.204(15)	-					

dieser Maxima sowie den unveränderten Mg-Parametern wurde eine Fourier-Synthese nach vorangegangener Struktur-Faktorrechnung berechnet.

In dieser Fourier-Synthese waren auch die übrigen Atome zu finden und die daraus gewonnenen Parameter konnten das Patterson-Bild eindeutig erklären.

Die Struktur-Verfeinerung erfolgte durch ein "Least squares" Programm wie beim TALK I. Eine Differenzen-Fourier mit den verfeinerten Parametern, R-Wert 11,0, ergab die Lage des H-Atoms. Die Endverfeinerung mit individuellen anisotropen Temperaturfaktoren ergab einen R-Wert von $R = 10.5$.

Die Parameter der Struktur sind in Tabelle (10) angegeben. Im nächsten Abschnitt sollen die zwei Strukturen, TALK I, TALK II, sowie die Unterschiede zwischen den beiden Strukturen und der Umwandlungsmechanismus beschrieben werden.

Strukturbeschreibung

Das Bauprinzip beider Strukturvarianten ist das gleiche. Die Struktur besteht aus zweidimensional unendlichen Schichten zusammenhängender $(\text{Si}_2\text{O}_5)^{2-}$ -Tetraeder. Die Stapelung zweier entgegengesetzt orientierter Tetraeder-Schichten läßt Oktaederlücken entstehen, die vollständig mit Mg-Atomen besetzt werden. Jedes Oktaeder besteht aus vier Tetraeder-spitzen-Sauerstoffen und zwei zusätzlich eingelagerten (OH)-Gruppen.

Zur genauen Beschreibung und Unterscheidung der zwei Strukturvarianten bietet sich am besten die (001)-Ebene als Projektionsebene an, da die strukturaufbauenden Schichten parallel zu der (001)-Ebene liegen. Man kann beide Talk-Struktur-Varianten in vier Ebenen zerlegen, die parallel zu (001) verlaufen. Die erste Ebene besteht aus den Mg-Atomen, die zweite Ebene aus Tetraederspitzensauerstoffen sowie (OH)-Gruppen, die dritte Ebene aus Si-Atomen und die vierte Ebene aus Basis-Sauerstoffen der SiO_4 -Tetraeder. Im folgenden sollen die einzelnen Ebenen genau beschrieben werden.

1. Mg-Atome

Die Mg-Atome bilden ein C-Netz (zentriertes Sechsecknetz). In jedem Punkt des Netzes stoßen sechs Dreiecke zusammen.

Die Kantenlänge der Hexagone beträgt $3.05 \text{ \AA}$. Die Hexagonalität der Schicht ist recht gut erfüllt. Die Hexagone beginnen im Nullpunkt und sind derart angeordnet, daß Kanten parallel zur b-Achse liegen. Abb. (7). Diese Mg-Atom-Anordnung ist in beiden Struktur-Varianten gleich.

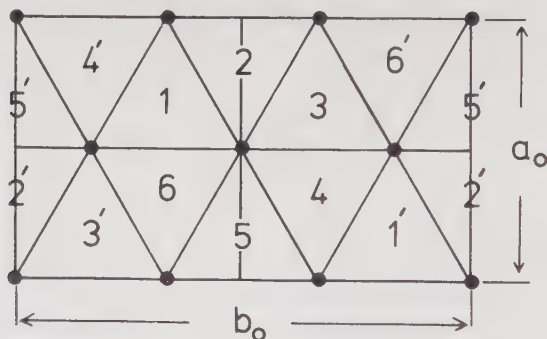


Abb. (7). Mg-Schicht in der (001)-Projektion.

Jedes C-Netz läßt sich in gleichseitige Dreiecke zerlegen, welche die Ebene lückenlos überdecken.

Für die weitere Strukturbeschreibung werden die durch die Mg-Atome entstandenen Dreiecke numeriert. Gestrichene Dreiecke sind bezüglich C_T translatorisch gleichwertig mit ungestrichenen.

2. O, (OH)-Schicht

Unterscheidet man nicht Tetraederspitzen-Sauerstoffe von (OH)-Sauerstoffen, so bilden beide Atomarten zusammen ebenfalls ein C-Netz. Die Kantenlänge der Hexagone beträgt $3.05 \text{ \AA}$.

Diese Schicht ist derart orientiert, daß sämtliche Kanten der Hexagone parallel zu den Mg-Hexagonkanten liegen. Betrachtet man nur die Tetraederspitzen-Sauerstoffe, so bilden sie ein G-Netz (Graphit-Netz), welches durch (OH)-Sauerstoffe zentriert wird. Der Abstand des Graphit-Netzes der Tetraederspitzen-Sauerstoffe von der Mg-Ebene beträgt $1.09_5 \text{ \AA}$. Der Abstand der (OH)-Sauerstoffe beträgt $1.04 \text{ \AA}$, das heißt, die (OH)-Sauerstoffe liegen $0.05 \text{ \AA}$ tiefer als die Tetraeder-Spitzen. Die (OH)-Lagen bilden für sich ein C-Netz mit einer Kantenlänge der Hexagone von $5.29 \text{ \AA}$. Die Lokalisierung und Orientierung der Sauerstoff-Schicht ist eindeutig gegeben durch die Verteilung der (OH)-Sauerstoffe. Weil die Unterschiede beider Strukturvarianten, TALK I, TALK II in der Verteilung der (OH)-Sauerstoffe liegen, werden beide Strukturen getrennt betrachtet.

TALK I

Die (OH)-Sauerstoffe zentrieren die Dreiecke 4 und $4''$ Abb. (7), und dadurch bleiben für die Lage der Tetraeder-Spitzen-Sauerstoffe die Dreiecke 2, $2''$, 6, $6''$.

TALK II

Die (OH)-Sauerstoffe zentrieren die Dreiecke 2 und $2''$. Die Lage der Tetraeder-Spitzen ist gegeben durch die Dreiecke 4, $4''$, 6, $6''$. Diese unterschiedliche Verteilung der (OH)-Sauerstoffe und die damit verbundene Tetraederspitzenverteilung läßt sich durch keine

Symmetrie-Operation der Raumgruppe C_{2v} ineinander überführen.

3. Si-Atome

Die Si-Atome bilden ein G-Netz (Graphit-Netz), welches die gleiche Orientierung hat, wie die Tetraederspitzen-Sauerstoffe in beiden Strukturvarianten. Der Abstand des Graphit-Netzes von der Mg-Ebene beträgt $2.72 \text{ \AA}$. Die Kante der Hexagone beträgt $3.05 \text{ \AA}$.

4. O-Atome

Die Sauerstoffatome der Tetraederbasisflächen bilden ein N-Netz (Dreieck-Sechsecknetz). Die Kantenlänge der Hexagone bzw. Dreiecke ist $2.65 \text{ \AA}$ (O-O-Abstand = $2.65 \text{ \AA}$). Die Dreiecke des N-Netzes entsprechen der Basis der $(\text{SiO}_4)^{4-}$ -Tetraeder (Abb. 8). Sämtliche Sauerstoffe dieser Ebene sind Brückensauerstoffe, und dadurch entsteht eine unendlich ausgedehnte Tetraeder-Schicht. Die Orientierung dieser Ebene in der Zelle ist derart, daß die Si-Atome sowie die Tetraederspitzen-Sauerstoffe die in dem N-Netz auftretenden Dreiecke zentrieren (Projektion). Dann liegen in der Projektion die Sauerstoffe dieser Ebene zwischen zwei Si-Atomen. Die Hexagone werden in der Projektion von OH-Lagen zentriert. Der Abstand dieser Ebene von der Mg-Ebene beträgt $3.25 \text{ \AA}$, von der vorliegenden Si-Ebene $0.53 \text{ \AA}$.

Da die Mg-Ebene genau in der $\vec{a}_0, \vec{b}_0$ -Ebene liegt und ferner das Symmetrie-Zentrum im Nullpunkt mit Mg-Atom besetzt ist, erhält man durch Inversion der drei übrigen Ebenen drei weitere symmetriegleiche Ebenen unterhalb der Mg-Ebene.

Auf diese Art entsteht die oben genannte Stapelung der unendlich ausgedehnten $[\text{Si}_2\text{O}_5]^{2-}$ -Tetraeder-Schichten mit entgegengesetzt orientierten Tetraederspitzen, zwischen denen die Mg-Atome oktaedrisch koordiniert werden.

Der Abstand zwischen den abgeschlossenen Paketen beträgt $2.84 \text{ \AA}$. Da jedes Paket für sich bindungsmäßig abgesättigt ist, erfolgt die Verknüpfung zum nächsten Paket durch van der Waalsche Kräfte.

Durch diesen schwachen Bindungscharakter ist die gute Spaltbarkeit des Talkes nach (001) bedingt, da die Schichtpakete parallel zu dieser Ebene liegen. Abb. (9) gibt eine schematische Darstellung der einzelnen Ebenen wieder. Die Projektionsebene liegt senkrecht zu $\vec{a}_0$.

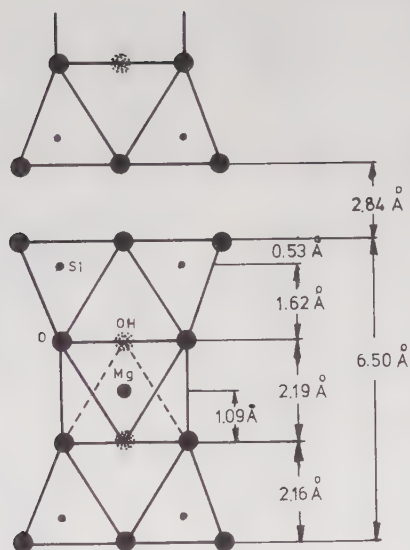
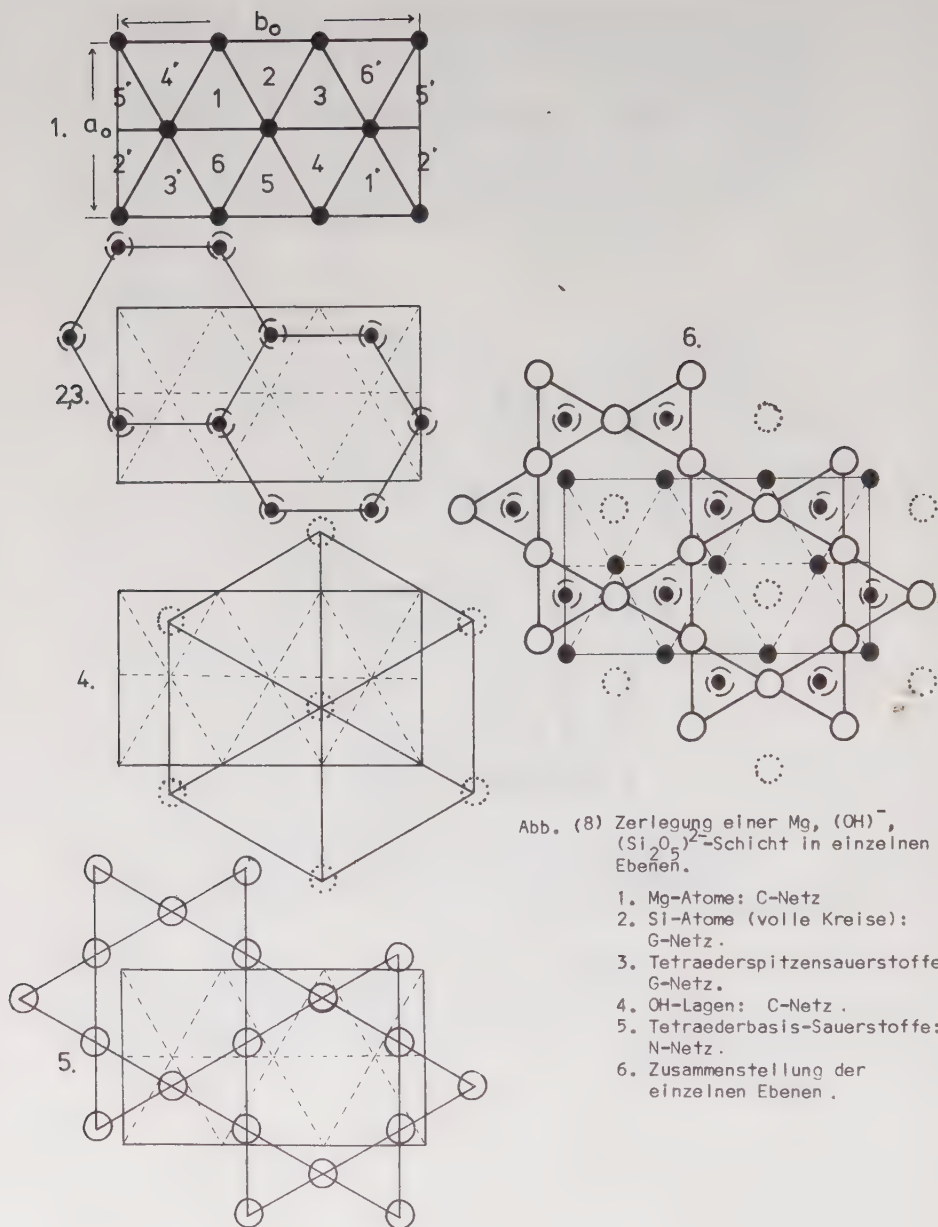
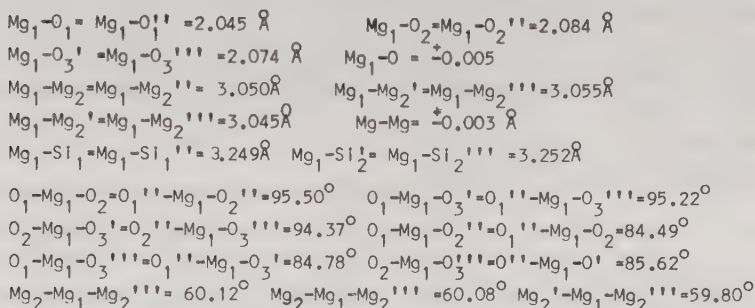


Abb.9.



Tabelle(). Abstände und Winkel vom T A L K I .

Mg₁.

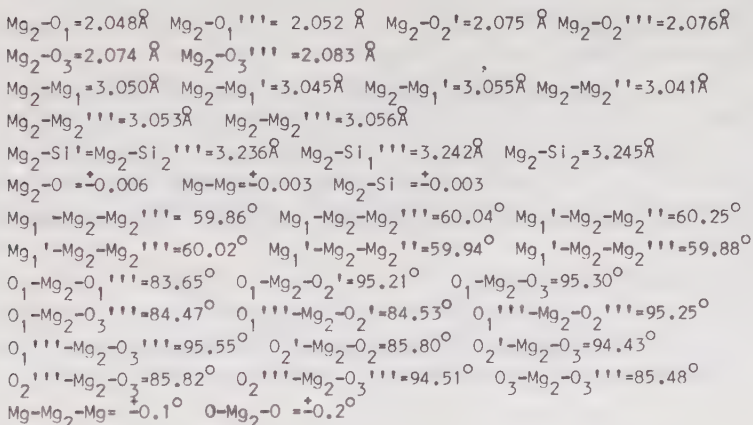


Koordinationspolyeder : Oktaeder .

Mg₁ ist von sechs Mg₂-Atomen umgeben in der Art, daß ein zentriertes Hexagon entsteht.

Mg₁ : Winkelgenauigkeit $\pm 0.2^\circ$

Mg₂ .

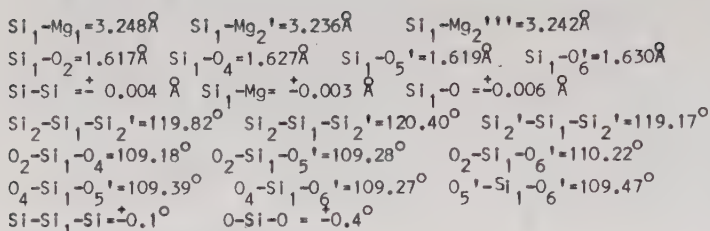


Koordinationspolyeder vom Mg₂: Oktaeder .

Die Kombination von Mg₁ mit Mg₂ ergibt zentrierte Hexagone: C-Netz .

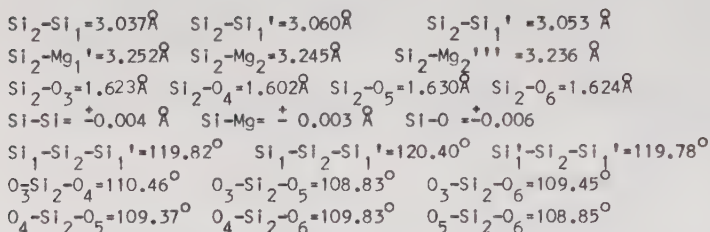
Si₁.





Koordinationspolyeder : Tetraeder .

Si_2 .

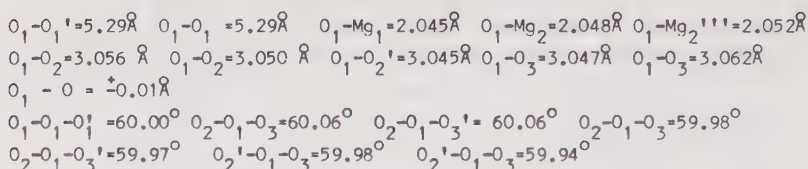


Koordinationspolyeder : Tetraeder .

Die Kombination von Si_1 mit Si_2 ergibt Graphit-Netze (G).

Si_2 : Winkelgenauigkeit $\pm 0.1^\circ$

O_1 (OH).

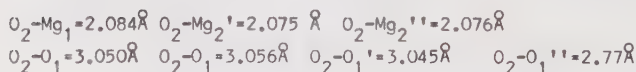


O_1 bildet mit symmetriegleichen O_1 -Lagen zentrierte Hexagone .

Die O_1 -Lagen zentrierte Hexagone, die aus O_2 und O_3 bestehen.

O_1 : Winkelgenauigkeit $\pm 0.1^\circ$

O_2 .



$$\begin{aligned} O_2-O_2' &= 2.826 \text{ \AA} & O_2-O_3 &= 3.055 \text{ \AA} & O_2-O_3' &= 3.045 \text{ \AA} & O_2-O_3'' &= 3.050 \text{ \AA} \\ O_2-O_3''' &= 2.826 \text{ \AA} & O_2-O_4 &= 2.644 \text{ \AA} & O_2-O_5 &= 2.638 \text{ \AA} & O_2-O_6 &= 2.663 \text{ \AA} \\ O_3-O_2-O_3' &= 120.09^\circ & O_3-O_2-O_3'' &= 119.56^\circ & O_3'-O_2-O_3' &= 120.35^\circ \\ O_1-O_2-O_1' &= 119.97^\circ & O_1-O_2-O_1'' &= 119.87^\circ & O_1-O_2-O_1''' &= 120.03^\circ \end{aligned}$$

Abstände: $\pm 0.01 \text{ \AA}$ Winkel : $\pm 0.1^\circ$.

O_3 :

$$\begin{aligned} O_3-Mg_1' &= 2.074 \text{ \AA} & O_3-Mg_2 &= 2.074 \text{ \AA} & O_3-Mg_2''' &= 2.083 \text{ \AA} \\ O_3-O_1 &= 3.047 \text{ \AA} & O_3-O_1' &= 3.043 \text{ \AA} & O_3-O_1'' &= 3.062 \text{ \AA} & O_3-O_2 &= 3.055 \text{ \AA} \\ O_3-O_2' &= 3.050 \text{ \AA} & O_3-O_2'' &= 3.045 \text{ \AA} & O_3-O_1''' &= 2.777 \text{ \AA} & O_3-O_2''' &= 2.826 \text{ \AA} \\ O_3-O_3''' &= 2.821 \text{ \AA} & O_3-O_4 &= 2.649 \text{ \AA} & O_3-O_5 &= 2.645 \text{ \AA} & O_3-O_6 &= 2.651 \text{ \AA} \\ O_1-O_3-O_1' &= 119.89^\circ & O_1-O_3-O_1'' &= 119.92^\circ & O_1-O_3-O_1''' &= 120.07^\circ \\ O_2-O_3-O_2' &= 119.56^\circ & O_2-O_3-O_2'' &= 120.10^\circ & O_2'-O_3-O_2' &= 120.34^\circ \end{aligned}$$

Die Kombination von O_2 mit O_3 ergibt Graphit-Netze, die von $O_1(OH)$ -Lagen zentriert werden .

Winkel- und Abstände genauigkeit wie O_1 , O_2 .

O_4 .

$$\begin{aligned} O_4-Si_1 &= 1.627 \text{ \AA} & O_4-Si_2 &= 1.602 \text{ \AA} & O_4-O_2 &= 2.644 \text{ \AA} & O_4-O_3 &= 2.649 \text{ \AA} \\ O_4-O_5 &= 2.637 \text{ \AA} & O_4-O_5' &= 2.649 \text{ \AA} & O_4-O_6 &= 2.640 \text{ \AA} & O_4-O_6' &= 2.656 \text{ \AA} \\ O_5-O_4-O_6 &= 60.20^\circ & O_5'-O_4-O_6' &= 127.13^\circ & O_5'-O_4-O_6 &= 112.66^\circ & O_5'-O_4-O_6' &= 60.00^\circ \end{aligned}$$

O_4, O_5, O_6 : Abstände $\pm 0.01 \text{ \AA}$, Winkel $\pm 0.1^\circ$

O_5 .

$$\begin{aligned} O_5-Si_1' &= 1.619 \text{ \AA} & O_5-Si_2' &= 1.630 \text{ \AA} & O_5-O_2' &= 2.639 \text{ \AA} & O_5-O_3' &= 2.645 \text{ \AA} \\ O_5-O_4 &= 2.637 \text{ \AA} & O_5'-O_4' &= 2.649 \text{ \AA} & O_5-O_6 &= 2.652 \text{ \AA} & O_5'-O_6' &= 2.646 \text{ \AA} \\ O_4-O_5-O_6 &= 112.72^\circ & O_4'-O_5'-O_6' &= 59.95^\circ & O_4'-O_5'-O_6 &= 127.18^\circ & O_4'-O_5'-O_6' &= 60.13^\circ \end{aligned}$$

O_6 .

$$\begin{aligned} O_6-Si_1' &= 1.630 \text{ \AA} & O_6-Si_2' &= 1.624 \text{ \AA} & O_6-O_2' &= 2.663 \text{ \AA} & O_6-O_3' &= 2.651 \text{ \AA} \\ O_6-O_4 &= 2.640 \text{ \AA} & O_6'-O_4' &= 2.656 \text{ \AA} & O_6-O_5 &= 2.646 \text{ \AA} & O_6'-O_5' &= 2.652 \text{ \AA} \\ O_4-O_6-O_5 &= 59.84^\circ & O_4'-O_6'-O_5' &= 127.47^\circ & O_4'-O_6'-O_5 &= 112.81^\circ & O_4'-O_6'-O_5' &= 59.86^\circ \end{aligned}$$

Die Kombination von O_4 , O_5 und O_6 ergibt ein Sechseck- Dreieck-Netz(N).

Die obigen, mit Strichen markierten Atome sind aus den ungestrichenen durch folgende Symmetrieeoperationen hervorgegangen:

'	1+C	:1/2 +X	1/2 +Y	Z
''	$\bar{1}$	-X	-Y	-Z
'''	$\bar{1} + C$	1/2 -X	1/2 -Y	-Z

Interatomare Abstände und Winkel vom T A L K II.

Mg₁.

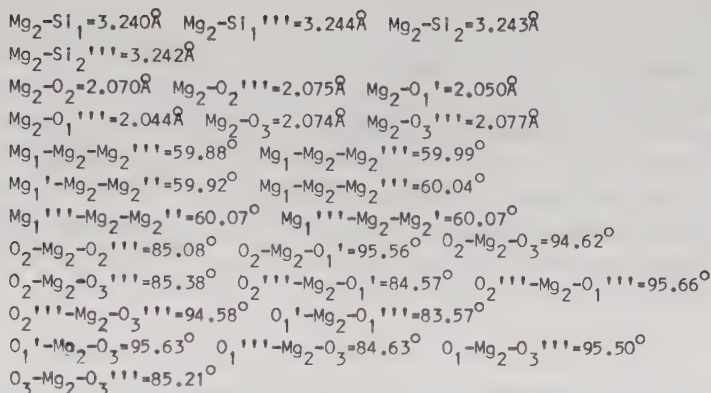
$Mg_1-Mg_2=Mg_1-Mg_2''=3.056\text{\AA}$ $Mg_1-Mg_2'=Mg_1-Mg_2'''=3.055\text{\AA}$
 $Mg_1-Mg_2''=Mg_1-Mg_2'''=3.050\text{\AA}$
 $Mg_1-Si_1=Mg_1-Si_1''=3.242\text{\AA}$ $Mg_1-Si_2=Mg_1-Si_2''=3.241\text{\AA}$
 $Mg_1-O_2=Mg_1-O_2''=2.081\text{\AA}$ $Mg_1-O_1=Mg_1-O_1''=2.049\text{\AA}$ $Mg_1-O_3=Mg_1-O_3''=2.078\text{\AA}$
 $Mg_1-Mg=0.001$ $Mg_1-Si=0.001$ $Mg_1-O=0.003\text{\AA}$
 $Mg_2-Mg_1-Mg_2''=60.04^\circ$ $Mg_2-Mg_1-Mg_2'''=59.96^\circ$ $Mg_2-Mg_1-Mg_2''''=60.00^\circ$
 $O_2-Mg_1-O_3''=O_2''-Mg_1-O_3''=94.93^\circ$ $O_2-Mg_1-O_3'''=O_2'''-Mg_1-O_3'''=85.06^\circ$
 $O_2''-Mg_1-O_1''=O_2''-Mg_1-O_1''=84.45^\circ$ $O_2''-Mg_1-O_1'''=O_2''-Mg_1-O_1'''=95.55^\circ$
 $O_1-Mg_1-O_3''=O_1''-Mg_1-O_3''=95.59^\circ$ $O_1-Mg_1-O_3'''=O_1'''-Mg_1-O_3'''=84.40^\circ$
 Koordinationspolyeder: Oktaeder.

Mg₁ ist von sechs Mg₂ umgeben in der Art, daß ein zentriertes Hexagon entsteht.

Mg₁: Winkelgenauigkeit $\pm 0.05-0.1^\circ$.

Mg₂.

$Mg_2-Mg_1=3.056\text{\AA}$ $Mg_2-Mg_1'=3.050\text{\AA}$ $Mg_2-Mg_1''=3.055\text{\AA}$ $Mg_2-Mg_1'''=3.053\text{\AA}$
 $Mg_2-Mg_2''=3.055\text{\AA}$ $Mg_2-Mg_2'''=3.054\text{\AA}$

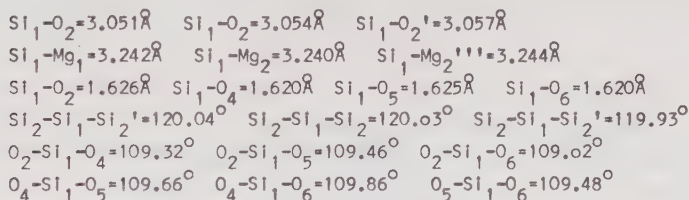


Koordinationspolyeder : Oktaeder.

Kombination von Mg_1 mit Mg_2 ergibt zentrierte Hexagone : C-Netz.

Mg_2 : Abstände- und Winkelgenauigkeit wie Mg_1 .

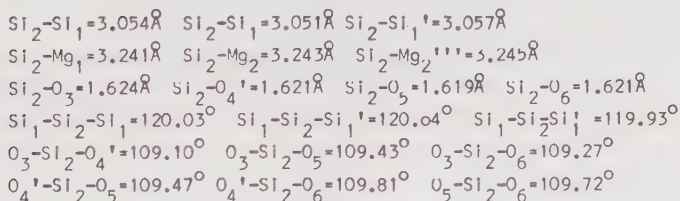
Si_1 .



Koordinationspolyeder von Si_1 : Tetraeder.

Si_1 : Abständegenauigkeit $\pm 0.002 - 0.003 \text{ \AA}$.
Winkelgenauigkeit $\pm 0.05 - 0.15^\circ$.

Si_2 .



Koordinationspolyeder von Si_2 : Tetraeder.

Kombination von Si_1 mit Si_2 ergibt ein Graphit-Netz (G).

Si_2 : Winkel- und Abständegenauigkeit wie Si_1 .

$O_1(OH)$.

$O_1-O_1'=5.29\text{\AA}$ $O_1-O_1=5.29\text{\AA}$ $O_1-Mg_1=2.049\text{\AA}$ $O_1-Mg_2=2.050\text{\AA}$
 $O_1-Mg_2'''=2.044\text{\AA}$ $O_1-O_2=3.059\text{\AA}$ $O_1-O_2'=3.052\text{\AA}$ $O_1-O_2=3.053\text{\AA}$
 $O_1-O_3=3.056\text{\AA}$ $O_1-O_3'=3.056\text{\AA}$ $O_1-O_3'=3.057\text{\AA}$
 $O_1-O_1-O_1'=60.0^\circ$ $O_2-O_1-O_3=60.00^\circ$ $O_2-O_1-O_3'=60.22^\circ$ $O_2-O_1-O_3=59.82^\circ$
 $O_2-O_1-O_3'=60.15^\circ$ $O_2'-O_1-O_3'=59.83^\circ$ $O_2'-O_1-O_3=59.93^\circ$
 O_1 bildet mit symmetriegleichen O_1 -Lagen zentrierte Hexagone(C-Netze).
 Die O_1 -Lagen zentrieren die Hexagone ,die aus O_2 und O_3 gebildet werden.

O_2 .

$O_2-Mg_1=2.081\text{\AA}$ $O_2-Mg_2=2.070\text{\AA}$ $O_2-Mg_2'''=2.075\text{\AA}$ $O_2-Si_1=1.626\text{\AA}$
 $O_2-O_1=3.060\text{\AA}$ $O_2-O_1=3.053\text{\AA}$ $O_2-O_1'=3.052\text{\AA}$ $O_2-O_3=3.046\text{\AA}$
 $O_2-O_3=3.051\text{\AA}$ $O_2-O_3'=3.065\text{\AA}$ $O_2-O_1'''=2.80\text{\AA}$ $O_2-O_1''=2.776\text{\AA}$
 $O_2-O_3'''=2.812\text{\AA}$ $O_2-O_4=2.648\text{\AA}$ $O_2-O_5=2.655\text{\AA}$ $O_2-O_6=2.643\text{\AA}$
 $O_1-O_2-O_1=119.80^\circ$ $O_1-O_2-O_1'=120.67^\circ$ $O_1-O_2-O_1'=120.04^\circ$
 $O_3-O_2-O_3=120.27^\circ$ $O_3-O_2-O_3'=119.83^\circ$ $O_3-O_2-O_3'=119.89^\circ$

O_3 :

$O_3-Mg_1=2.078\text{\AA}$ $O_3-Mg_2=2.074\text{\AA}$ $O_3-Mg_2'''=2.077\text{\AA}$
 $O_3-Si_2=1.624\text{\AA}$ $O_3-O_2=3.051\text{\AA}$ $O_3-O_2=3.046\text{\AA}$ $O_3-O_2'=3.065\text{\AA}$
 $O_3-O_1=3.050\text{\AA}$ $O_3-O_1'=3.057\text{\AA}$ $O_3-O_1'=3.056\text{\AA}$ $O_3-O_2'''=2.812\text{\AA}$
 $O_3-O_1'''=2.772\text{\AA}$ $O_3-O_3'''=2.810\text{\AA}$ $O_3-O_4=2.644\text{\AA}$
 $O_3-O_5=2.648\text{\AA}$ $O_3-O_6=2.647\text{\AA}$

$O_2-O_3-O_2=120.27^\circ$ $O_2-O_3-O_2'=119.89^\circ$ $O_2-O_3-O_2'=119.83^\circ$
 $O_1-O_3-O_1'=119.96^\circ$ $O_1-O_3-O_1'=120.20^\circ$ $O_1-O_3-O_1'=119.75^\circ$

Die Kombination von O_2 mit O_3 ergibt ein Graphit-Netz(G) .

O_1, O_2, O_3 : Abstände $\pm 0.003 - 0.005 \text{\AA}$. Winkel $\pm 0.05 - 0.1^\circ$.

O_4 .

$O_4-Si_1=1.620\text{\AA}$ $O_4-Si_2=1.621\text{\AA}$
 $O_4-O_2=2.649\text{\AA}$ $O_4-O_3=2.645\text{\AA}$ $O_4-O_5=2.653\text{\AA}$ $O_4-O_5'=2.646\text{\AA}$
 $O_4-O_6=2.651\text{\AA}$ $O_4-O_6'=2.653\text{\AA}$
 $O_5-O_4-O_6=59.92^\circ$ $O_5-O_4-O_6'=127.32^\circ$ $O_5'-O_4-O_6=112.74^\circ$ $O_5'-O_4-O_6'=60.01^\circ$

O₅•

$$\begin{aligned} O_5-SI_1 &= 1.625 \text{ \AA} & O_5-SI_2 &= 1.619 \text{ \AA} \\ O_5-O_2 &= 2.655 \text{ \AA} & O_5-O_3 &= 2.649 \text{ \AA} & O_5-O_4 &= 2.653 \text{ \AA} & O_5-O_4' &= 2.646 \text{ \AA} \\ O_5-O_6 &= 2.650 \text{ \AA} & O_5-O_6' &= 2.649 \text{ \AA} \\ O_4-O_5-O_6 &= 112.50^\circ & O_4-O_5-O_6' &= 60.00^\circ & O_4'-O_5-O_6 &= 60.13^\circ \\ O_4'-O_5-O_6' &= 127.32^\circ \end{aligned}$$

O₆•

$$\begin{aligned} O_6-SI_1 &= 1.619 \text{ \AA} & O_6-SI_2 &= 1.621 \text{ \AA} \\ O_6-O_2 &= 2.644 \text{ \AA} & O_6-O_3 &= 2.648 \text{ \AA} & O_6-O_4 &= 2.651 \text{ \AA} & O_6-O_4' &= 2.653 \text{ \AA} \\ O_6-O_5 &= 2.649 \text{ \AA} & O_6-O_5' &= 2.650 \text{ \AA} \\ O_4-O_6-O_5 &= 60.07^\circ & O_4-O_6-O_5' &= 127.38^\circ & O_4'-O_6-O_5 &= 112.68^\circ & O_4'-O_6-O_5' &= 59.85^\circ \end{aligned}$$

Die Kombination von O₄, O₅, O₆ ergibt ein Sechseck- Dreieck-Netz (N) .

O₄, O₅, O₆ : Abstände $\pm 0.003-0.005$ \AA. Winkel $\pm 0.05-0.1^\circ$.

Gibt es weitere Talkstrukturvarianten?

Wie gezeigt wurde, bestehen die Unterschiede der zwei beschriebenen Strukturvarianten in der Verteilung der (OH)-Lagen und der damit verknüpften Si-Verteilung in der Elementarzelle. Die Untersuchung, ob es weitere Strukturvarianten gibt, soll mit Hilfe der Abbildung (7) erfolgen. Die Verteilung der (OH)-Lagen und Si-Atome muß immer eine oktaedrische Koordination der Mg-Atome zulassen.

Nimmt man für zwei zueinander zentrosymmetrisch gelegene (OH)-Netze und das eingelagerte Mg-Netz triklone Symmetrie an, dann gibt es sechs symmetrisch verschiedene Ausgangslagen für die (OH)-Gruppe, um eine oktaedrische Umgebung für ein Mg-Atom aufzubauen. Von den sechs Lagen wurden bereits zwei gefunden.

1. TALK I

(OH) : 4, 4'

Si : 2, 2', 6, 6'

2. TALK II

(OH) : 2, 2'

Si : 4, 4', 6, 6'

Man kann an der Abb. (7) leicht erkennen, daß TALK II aus TALK I durch Verschiebung um $1/3 b_0$ entsteht.

Dem Strukturvorschlag von HENDRICKS entspricht die Verteilung von TALK II.

Weitere Verteilungen sind noch möglich.

3. (OH) : 1, 1'

Si : 3, 3', 5, 5'

4. (OH) : 5, 5'

Si : 3, 3', 1, 1'

5. (OH) : 6, 6'

Si : 2, 2', 4, 4'

Diese Verteilung entspricht der Struktur von GRUNER.

6. (OH) : 3, 3".

Si : 1, 1', 5, 5".

Um den Fall einer Homometrie auszuschließen, wurden alle sechs Verteilungen mit den zwei Datensätzen von TALK I und TALK II durch das "Least squares"-Programm verfeinert. Der R-Wert war für alle Verteilungen, abgesehen von der richtigen Verteilung, größer als 50 %. K. H. SCHÜLLER (1971) untersuchte dilatometrisch, röntgenographisch und mit Hilfe von Mikrohärte-Messungen Specksteine verschiedener Herkunft und Korngröße. Die Ergebnisse dieser Untersuchungen lassen sich allein durch Korngröße-Unterschiede nicht erklären, und der Verfasser kommt zu dem Schluß, daß der Sprckstein aus verschiedenen Talkvarianten zusammengesetzt sein muß, die strukturelle Unterschiede aufweisen.

Wie wir auf Grund der vorliegenden Arbeit gesehen haben, gibt es mindestens zwei verschiedene Talkvarianten und vier weitere, die strukturell möglich wären.

Speckstein ist ein polykristallines Material, und es ist durchaus möglich, daß beide Talkvarianten (Talk I, Talk II) nebeneinander vorhanden sind.

Die zwei Talkvarianten können in reiner Form vorliegen, es können aber auch Kristallite vorliegen, die aus statistischen Überlagerungen von abgeschlossenen Paketen der zwei Strukturvarianten bestehen. Eine solche mögliche Überlagerung wäre zum Beispiel:

1-Paket Talk I, 2-Pakete Talk II, 2-Pakete Talk I usw.

Eine solche Überlagerungsart würde sich röntgenographisch durch Intensitätsunterschiede gegenüber Proben einer Talkvarianten bemerkbar machen.

Basistransformation und reduzierte Zelle

Bis jetzt wurde für die Strukturaufklärung und Strukturbeschreibung die C_1 -Aufstellung verwendet, weil die Beschreibung und der Vergleich mit anderen Phyllosilikaten dadurch erleichtert wird. Als nächstes soll der Übergang von der pseudomonoklinen Zelle in eine reduzierte primitive Zelle erfolgen. Die im folgenden angegebenen Basistransformationen entsprechen den reduzierten Zellen, die nach der Delaunay-Reduktion ermittelt wurden.

TALK I

Die primitive Zelle ist durch folgende Basistransformation wiedergegeben:

$$\vec{a}'' = 1/2 (\vec{a} + \vec{b})$$

$$\vec{b}'' = 1/2 (\vec{a} - \vec{b})$$

$$\vec{c}'' = \vec{c}$$

In Matrizenform dargestellt:

$$\begin{pmatrix} 1/2 & 1/2 & 0 \\ 1/2 & -1/2 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} a \\ b \\ c \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a'' \\ b'' \\ c'' \end{pmatrix}$$

T A B

A und B sind Spaltenmatrizen.

Die Transformation $P \rightarrow C$ ist durch die inverse Matrix T^{-1} gegeben.

$$T^{-1} = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 0 \\ 1 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

Das gleiche Basistransformationsverhalten gibt es auch für die Koordinaten des reziproken Gitters, nämlich:

$$H'' = 1/2 (H + K)$$

$$K'' = 1/2 (H - K)$$

$$L'' = L$$

Die Transformation der Strukturparameter in der neuen Basis ist durch die Transponierte von T^{-1} gegeben.

$$\bar{Y} = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 0 \\ 1 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \Rightarrow \begin{aligned} X' &= X + Y \\ Y' &= X - Y \\ Z' &= Z \end{aligned}$$

Mit Hilfe des metrischen Fundamentaltensors ergibt sich folgende Metrik für die reduzierte Zelle:

$$\begin{aligned} a'_0 &= 5.29 \text{ \AA} & \alpha' &= 93.70^\circ \\ b'_0 &= 5.29 \text{ \AA} & \beta' &= 95.15^\circ \\ c'_0 &= 9.47 \text{ \AA} & \gamma' &= 120.0^\circ \end{aligned}$$

Das Volumen der neuen Zelle beträgt: $V = 227 \text{ \AA}^3$ mit einem Molekül $(Mg_3(OH)_2(Si_4O_{10}))$, $Z = 1$ in der Elementar-Zelle.

Die Strukturparameter der neuen Zelle, Raumgruppe $P\bar{1}$, sind in Tabelle (11) angegeben.

TALK II

Die folgende Transformation führt zur reduzierten Zelle.

$$\begin{aligned} \vec{a}'' &= 1/2 (\vec{a} + \vec{b}) \\ \vec{b}'' &= 1/2 (\vec{a} - \vec{b}) \\ \vec{c}'' &= 1/2 (-\vec{a} + \vec{b}) + \vec{c} \end{aligned}$$

oder in Matrizenform:

$$\begin{pmatrix} 1/2 & 1/2 & 0 \\ 1/2 & -1/2 & 0 \\ -1/2 & 1/2 & 1 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} \vec{a} \\ \vec{b} \\ \vec{c} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \vec{a}'' \\ \vec{b}'' \\ \vec{c}'' \end{pmatrix}$$

$$T^{-1} = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 0 \\ 1 & -1 & 0 \\ 0 & 1 & 1 \end{pmatrix}$$

Die Transponierte der inversen Metrix für die Parameter-Transformation ist:

$$\bar{Y} = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 0 \\ 1 & -1 & 1 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad \text{oder} \quad \begin{aligned} X' &= X + Y \\ Y' &= X - Y + Z \\ Z' &= Z \end{aligned}$$

Für die reduzierte Zelle ergibt sich folgende Metrik:

$$\begin{aligned} a'_O &= 5.29 \text{ \AA} & \alpha' &= 96.35^\circ \\ b'_O &= 5.29 \text{ \AA} & \beta' &= 108.35^\circ \\ c'_O &= 10.45 \text{ \AA} & \gamma' &= 120.0^\circ \end{aligned}$$

$$V = 227 \text{ \AA}^3, Z = 1.$$

Die Parameter für die neue Aufstellung $P_{\bar{T}}$ sind in Tabelle (11) angegeben.

Durch Vergleich der neuen Parameter von TALK I und TALK II wird noch einmal sichtbar, daß es sich um zwei verschiedene Strukturen handelt.

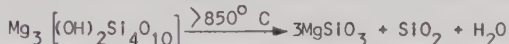
Tabelle (11). Koordinaten von TALK I und TALK II für die reduzierte Zelle. Raumgruppe: $P_{\bar{T}}$

TALK I					TALK II			
ATOM	X	Y	Z	B	X	Y	Z	B
Mg	0.0000	0.0000	0.0000	1.10	0.0000	0.0000	0.0000	0.38
Mg	0.3332	0.6658	0.0000	1.11	0.3333	0.6665	0.0000	0.39
Si	0.7478	0.7426	0.2910	1.13	0.6190	0.2095	0.2910	0.68
Si	0.0823	0.4122	0.2912	1.18	0.2855	0.5430	0.2911	0.68
OH	0.3658	0.0301	0.1117	1.62	0.7765	0.7466	0.1116	0.70
O	0.7003	0.6979	0.1181	1.45	0.4491	0.0836	0.1170	0.60
O	0.0353	0.3657	0.1176	1.69	0.1151	0.4183	0.1171	0.59
O	0.9142	0.5714	0.3494	1.61	0.4896	0.3986	0.3477	0.87
O	0.9507	0.0914	0.3487	1.49	0.5279	0.9176	0.3491	0.86
O	0.4321	0.6078	0.3506	1.64	0.0080	0.4354	0.3481	0.85

Strukturbestimmung und Verfeinerung am Protoenstatit

A. Experimentelles

Die von HARALDSEN (1930) beobachtete Umsetzung von Talk in Pyroxen verläuft nach folgendem Schema:



Es sei ausdrücklich darauf hingewiesen, daß das Stabilitätsfeld des aus Talk gewonnenen Protoenstatits nicht auf die reine Phase MgSiO_3 übertragen werden kann, weil bei der Zersetzung von Talk zu Protoenstatit SiO_2 frei wird, das die Stabilität des Protoenstatits stark beeinflusst.

Man erhält je nach Beschaffenheit des Ausgangsmaterials Protoenstatit in Polykristalliner- oder Einkristall-Form. In der vorliegenden Arbeit wurde Material aus dem gleichen Talk-Spaltstück verwendet, das für die Aufklärung der Talkstruktur herangezogen wurde. Spaltstücke, die thermisch zersetzt werden sollten, wurden zuerst auf Homogenität optisch untersucht.

Die thermische Zersetzung wurde in einem SILIT-Ofen durchgeführt. Da dieser keine Regeleinrichtung besaß, war die Temperaturschwankung bei niedrigen Temperaturen $\pm 15^\circ \text{ C}$ bei höheren Temperaturen (1300° C) $\pm 20^\circ - 30^\circ \text{ C}$.

Die experimentelle Durchführung der thermischen Zersetzung wurde folgendermaßen vorgenommen:

Der Ofen wurde zunächst auf die gewünschte Zersetzungstemperatur gebracht; in den aufgeheizten Ofen wurden optisch kontrollierte Spaltstücke eingeführt, die sich in einem Platintiegel befanden. Um ein Aufblättern der Talkstückchen zu verhindern, wie es bei einem zu schnellen Aufheizen durch zu plötzliche Entwässerung vorkommt, wurde der Tiegel etwa innerhalb fünf Minuten kontinuierlich durch das Temperaturgefälle des Ofens geschoben, bis er sich an der heißesten Stelle befand. Bei der Herausnahme aus dem Ofen wurden die Proben mit nachgereinigtem Stickstoff abgekühlt, erstens um

den Oxydationszustand bei der betreffenden Temperatur einzufrieren und zweitens eine eventuelle Umwandlung in Klinoenstatit durch schnelles Abkühlen zu verhindern. Die Talkproben wurden nach der Umwandlung zu Protoenstatit optisch sowie röntgenographisch untersucht.

Die optische Untersuchung erfolgte unter dem Stereo- und Polarisations-Mikroskop, die röntgenographische Untersuchung mit Pulver (Zählrohr-diffraktometer) und Einkristallmethoden (Weissenberg-Präzessions-Kamera). Es wurden bei verschiedenen Temperaturen jeweils mehrere Proben behandelt. Zunächst soll das Ergebnis der optischen sowie pulverröntgenographischen Untersuchung erläutert werden. Für die röntgenographische Untersuchung wurde Cu, K_{α} -Strahlung verwendet.

1. 960° C Temperzeit, 95 Stunden

Abb. (10) zeigt eine Elektronen-Raster-Aufnahme der Probe. Man beachte das Spaltsystem.

Die Probe ist dunkelbraun gefärbt durch die Oxydation des im Talk enthaltenen Eisens (1,26 % FeO). Optisch ist die einkristalline Form des Protoenstatits leicht zu erkennen durch die einheitliche Auslöschung des früheren Talkstückes. Röntgenographisch erhält man das reine Protoenstatit-Diagramm mit stark verbreiterten Reflexen, ein Hinweis für schlechte Kristallisation. SiO₂-Linien kommen nicht vor. Die vorhandene Kieselsäure muß also entweder amorph oder in sehr feiner Form vorliegen.

2. 1000° C Temperzeit; 50 Stunden

Wie Probe 1, die Protoenstatit-Linien werden schärfer.

3. 1060° C Temperzeit; 95 Stunden

Wie Probe 1 + 2, weitere Zunahme der Linienschärfe.

4. 1060° C Temperzeit; 144 Stunden

Wie Probe 3, es tritt die stärkste Cristobalitlinie $d_{(101)} = 4,05 \text{ \AA}$ auf.

5. 1160° C Temperzeit; 70 Stunden

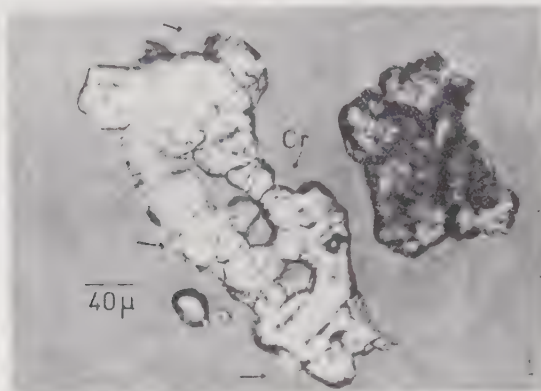
Das Eisen liegt vorwiegend als Fe²⁺ vor, die Probe ist weiß bis leicht gelblich.

6. 1180° C Temperzeit; 240 Stunden

Die weiß aussehende Probe gibt ein scharfes Protoenstatit - Diagramm. Es tritt die stärkste Cristobalit-Linie auf, sowie eine der stärksten Klinoenstatit-Linien ganz schwach bei $2\theta = 29,94^\circ$.



Abb. (10). Elektronen-Raster. Aufnahme von Probe 1 (960°C , 95 Stunden).
Man beachte das Spaltsystem im Kristall!



Probe 13. 1510°C , Temperzeit: 120 Stunden. Im Bild sind die Pyroxen-Einkristalle des Mosaiks zu erkennen. Die Cristobalit-Stellen (Cr.) sind im Bild mit Pfeilen angezeigt.

7. 1180° C Temperzeit, 265 Stunden

Die Talk-Probe war in reines MgO-Pulver eingebettet. Das Röntgen-diagramm ist das gleiche wie bei der Probe 6, doch mit einem höheren Klinoenstatitanteil.

8. 1225° C Temperzeit, 96 Stunden

Wie Probe 6.

9. 1300° C Temperzeit, 40 Stunden

Es entstehen Protoenstatit und Cristobalit.

10. 1300° C Temperzeit, 96 Stunden

Das Röntgendiagramm zeigt Protoenstatit, Klinoenstatit und Cristobalit.

11. 1380° C Temperzeit, 48 Stunden

Es entstehen Protoenstatit und Cristobalit.

12. 1380° C Temperzeit, 72 Stunden

Es entstehen Protoenstatit, Klinoenstatit und Cristobalit.

13. 1510° C Temperzeit, 120 Stunden

Röntgenographisch erhält man ein Klinoenstatit-Diagramm mit Cristobalit-Linien.

Interessant ist die optische Untersuchung dieser Probe. Das Talk-Stückchen ist in ein Mosaik umgewandelt. Die Bausteine des Mosaiks sind Einkristalle mit einer Korngröße 10 - 20 μ , selten bis 50 μ , die teilweise lamellar verzwilligt sind. Die Einkristalle des Mosaiks haben die gleiche Orientierung, so daß die ganze Probe als Einkristall wirkt, denn im Polarisationsmikroskop löschen alle Kristalle gleichzeitig aus.

Dieser vorliegende experimentelle Befund läßt sich wie folgt zusammenfassen:

Durch die thermische Zersetzung des Talkes entsteht Protoenstatit. Durch Erhöhung der Temperatur wird die Kristallisationsgeschwindigkeit des Protoenstatits stark heraufgesetzt, wie die schärfer werdenden Linien im Röntgendiagramm beweisen. Die bei der Zersetzung des Talkes freiwerdende Kieselsäure (16.5 gew. % SiO_2) verhält sich in den Versuchen 1, 2 und 3 amorph.

Ob wirklich die Kieselsäure in diesen Versuchen in amorphen Zustand vorliegt, konnte auf Grund dieses Befundes nicht entschieden werden. Aufnahmen mit dem Raster-Elektronenmikroskop gaben ebenfalls keinen Anhaltspunkt für die Klärung dieser Frage. Es schien nämlich denkbar, daß die Kieselsäure bedingt durch die kurze Dauer der Versuche in einer zu feinen kristallinen Form, röntgenographisch nicht nachweisbar, vorlag.

Diese Auffassung scheint durch den Versuch 4 bestätigt zu werden, bei dem ohne Erhöhung der Temperatur durch längeres Tempern (144 Stunden) die stärkste Cristobalit-Linie auftrat. Die Reaktionszeiten bis zur röntgenographischen Nachweisbarkeitsgrenze des Cristobalit mit zunehmender Temperatur werden stark verkürzt. So sind z. B. bei 1300°C 40 Stunden erforderlich um Cristobalit nachzuweisen. Ob die Nachweisbarkeitsgrenze durch Sammelkristallisation von feinen Cristobalit-Kristallen oder durch Auskristallisieren von amorphen SiO_2 erreicht wird, läßt sich aus diesen Untersuchungen nicht entnehmen. Die in den Versuchen 6, 10 und 12 auftretenden Klinoenstatit-Linien bestätigen die Angaben von SCHWAB (1966), daß mit zunehmendem Cristobalit-Anteil der SiO_2 -Phase Protoenstatit instabil wird. Denn, wird ein großer Teil der Kieselsäure auskristallisiert, dann genügt die kleinste Energiezufuhr, um Protoenstatit in Klinoenstatit umzuwandeln. Diese Energiezufuhr kann zum Beispiel durch das Malen der Probe für die Röntgenaufnahme erfolgen. Als Beweis dafür sei erwähnt, daß bei Einkristallaufnahmen nie Klinoenstatit-Reflexe auftreten.

Einkristall Untersuchungen von thermisch zersetztem Talk

Sämtliche Proben wurden mit Einkristallmethoden untersucht. Für die Einkristallaufnahmen wurde eine integrierende Weissenberg- sowie eine Präzessions-Kammer verwendet. Da die (001) Ebene von Talk nach der Umwandlung zu Protoenstatit morphologisch erhalten bleibt und im Zweikreisgoniometer reflektiert, wurde die Justierung auf die gleiche Art durchgeführt wie beim Talk. Sämtliche Proben, die schon mit Pulver-Methoden untersucht waren, zeigten, daß die Umwandlung von Talk-Einkristallen zu Protoenstatit-Einkristallen erfolgte, wie auch LINDEMANN (1955) ebenfalls angibt. Im Gegensatz zu LINDEMANN zeigten sämtliche Proben rhombische Symmetrie statt monokliner. Auf Grund von Weissenberg- und Präzessions-Aufnahmen findet man folgende Auslöschungsgesetze:

h00	:	h	=	2n	vorhanden
0k0	:	k	=	2n	"
00l	:	l	=	2n	"
hk0	:	h+k	=	2n	"
h0l	:	l	=	2n	"
0kl	:	k	=	2n	"

Auf Grund dieser Auslöschungsgesetze ergibt sich die Raumgruppe D_{2h}^{14} -Pbcn. Nach den Weissenberg- und Präzessions-Aufnahmen findet man folgende Gitterkonstanten:

$$\begin{aligned} a_o &= 9.20 \text{ \AA} \\ b_o &= 8.77 \text{ \AA} \\ c_o &= 5.32 \text{ \AA} \\ V &= 429 \text{ \AA}^3 \\ Z &= 8 \end{aligned}$$

Die Röntgendichte ist: $D_r = 3.1 \text{ gr./cm}^3$ berechnet für die reine Phase MgSiO_3 . Die Güte der Protoenstatit-Röntgenaufnahmen ist mit Talk-Aufnahmen nicht zu vergleichen, da trotz Vorsichtsmaßnahmen

eine gewisse Aufblätterung des Ausgangsmaterials nicht vermieden werden kann. Die Reflexe zeigen gewisse Verbreiterung längs der ψ -Achse in Weissenberg-Aufnahmen. Enthält die Probe Cristobalit, so macht er sich als Pulverlinie durch den stärksten Reflex (101) parallel zu ψ -Achse mit $2\theta = 21,90^\circ$ oder als Ring um den Nullpunkt in Präzessions-Aufnahmen mit $d_{(101)} = 4,05 \text{ \AA}$ bemerkbar. Klinoenstatit-Linien wurden in keiner Aufnahme gefunden. Einkristallaufnahmen von Kristallen der Probe 12 ergeben die Raumgruppe Pbca (Orthoenstatit). Wie schon erwähnt, ist Probe 13 ein Mosaik mit kleinen Einkristallen. Isoliert man ein Kriställchen, so zeigen die Einkristallaufnahmen einen hochgeordneten Orthoenstatit.

Strukturbestimmung und Verfeinerung am Protoenstatit

Intensitäten:

Die Probe 6 (1180°C 240 Stunden) erschien wegen der Reflexbeschaffenheit als die geeignetste und wurde für die Intensitätsbestimmung verwendet. Die in den Weissenberg-Aufnahmen auftretende stärkste Cristobalit-Linie ist für die Intensitätsbestimmung ohne Bedeutung.

Für die Intensitätsbestimmung wurden integrierende Weissenberg-Aufnahmen verwendet, genau nach dem gleichen Verfahren wie beim Talk. Es wurden sieben Schichten um $[10]$ aufgenommen nämlich (h0l), (h1l), (h2l), (h3l), (h4l), (h5l), (h6l). Die Lorentz- und Polarisations-Korrektur der photometrierten Intensitäten wurden mit dem gleichen Programm wie beim Talk durchgeführt.

Strukturbestimmung

Die Struktur von Protoenstatit wurde mit Hilfe der Patterson-Funktion gelöst. Mit den 194 symmetrieunabhängigen Reflexen wurde eine Patterson-Synthese berechnet. Trotz des starken Abbrucheffektes, als Folge des begrenzten Daten-Satzes, läßt sich das Patterson-Bild auf Grund der hohen Symmetrie der Raumgruppe $P 2_1/b 2/c 2_1/n$ leicht deuten. Die Raumgruppe $Pbcn$ impliziert in der Patterson-Funktion drei Harker-Schnitte, erzeugt durch die Dreh- bzw. Schrauben-Achsen und drei Harker-Geraden hervorgerufen durch die Gleitspiegelebenen. Es gelten für die Maxima in der Patterson-Funktion, die durch die erwähnten Symmetrie-Elemente entstehen, folgende Beziehungen:

Ein Punkt mit der allgemeinen Lage XYZ wird bei üblicher Wahl des Nullpunktes durch die Gleitspiegelebene b in den Punkt $1/2 - X, 1/2 + Y, Z$ übergeführt. Der Differenzenvektor zwischen beiden Punkten ist dann $1/2 - 2X, 1/2, 0$. Also muß in der Patterson-Synthese auf der Geraden $u, 1/2, 0$ ein Maximum erscheinen, das von diesem symmetrisch äquivalenten Atompaar herrührt. Die X-Koordinate des Ausgangspunktes läßt sich aus dem u-Wert des Maximums ermitteln, es ist $X = 1/4 - \frac{u}{2}$. Entsprechend gilt für die Gleitspiegelebene c: $XYZ \rightarrow X, -Y, 1/2 + Z$, daraus entsteht ein Maximum auf der Geraden $0, -2Y, 1/2 \approx 0, v, 1/2$ oder $Y = -\frac{v}{2}$. Völlig analog findet man über die Gleitspiegelebene n, $Z = 1/4 - \frac{w}{2}$ wobei dieses Maximum auf der Geraden $1/2, 1/2, w$ liegen muß. Die so erhaltenen Koordinaten für eine mögliche Atom-Lage lassen sich über die Harker-Schnitte kontrollieren. Aus der 2_1 in a-Richtung folgt:

$$XYZ \rightarrow 1/2 + X, 1/2 - Y, -Z \Rightarrow 1/2, 1/2 - 2Y, -2Z \hat{=} 1/2, v, w$$

Wenn die für X und Y ermittelten Werte einer tatsächlichen Atomlage entsprechen, muß also in der Patterson-Funktion in der Ebene $1/2, v, w$ mit $v = 1/2 - 2Y$ und $w = -2Z$ ein hinreichend großes Maximum vorhanden sein. Für die 2-Achse in b-Richtung gilt ganz entsprechend:

$$XYZ \rightarrow -X, 1/2 - Z \Rightarrow -2X, 0, 1/2 - 2Z \hat{=} u, 0, w, \text{ also muß in}$$

der Ebene uOw an der Stelle $u = -2X$ und $w = 1/2 - 2Z$ ebenfalls ein Maximum liegen.

Für die 2_1 -Achse in c -Richtung gilt schließlich:

$XYZ \rightarrow 1/2 - X, 1/2 - Y, 1/2 + Z \Rightarrow 1/2 - 2X, 1/2 - 2Y, 1/2 \hat{=} u, v, 1/2$, also muß in der Ebene $u, v, 1/2$ an der Stelle $u = 1/2 - 2X, v = 1/2 - 2Y$ ein weiteres Maximum auftreten.

Die allgemeine Punktlage in der Raumgruppe $Pbcn$ ist achtzählig; da acht Formeleinheiten $MgSiO_3$ in der ganzen Zelle vorhanden sind, müßten die Koordinaten für 1 Mg-, 1 Si- und 3 O-Atome ermittelt werden, wenn jedes der fünf Atome die allgemeine Punktlage besetzt.

Demnächst werden, nach der angegebenen Weise, die Koordinaten des Si-Atoms ermittelt, da es das schwerste Atom in der Elementarzelle ist. Als Parameter wurden gefunden:

$$X = 0.206, Y = 0.087, Z = 0.071$$

Aus der Diskussion der übrigen Maxima ergab sich, daß möglicherweise von den Mg-Atomen spezielle Punktlagen angenommen werden. Da in einem solchen Fall Mehrdeutigkeiten vorkommen können, wurde auf die weitere direkte Interpretation der Patterson-Funktion verzichtet.

Nach der Bestimmung der Si-Lage ist es möglich, entweder die Nicht-Harker-Maxima zum Aufsuchen der Mg-Lagen heranzuziehen oder unter Verwendung des jetzt eindeutig bestimmbar 2 $\bar{1}$ -Maximums des Si-Atoms die ganze Struktur über eine Superposition zu lösen. Beide Verfahren wurden angewendet. Für die Behandlung der Nicht-Harker-Maxima ist es üblich, ein sogenanntes Koordinaten-Schema aufzustellen. Man denkt sich dabei die allgemeine Punktlage von zwei unabhängigen Atomen besetzt, bildet für jedes Atom alle symmetrieäquivalente Lagen und trägt in eine quadratisch angelegte Tabelle alle möglichen Koordinaten-Differenzen ein. Das ergäbe in unserem Falle eine Tabelle von 16 Spalten, in der zwei Blöcke von $8 \times 8 = 64$ Koordinaten-Differenzen auftreten, welche die Vektoren zwischen symmetrisch ungleichwertigen Atomen, also Nicht-Harker-Maxima darstellen. Es läßt sich leicht einsehen, daß die beiden 8×8 -Blöcke übereinstimmen. Es ergeben sich

also für ein Atompaar in der ganzen Zelle 64 verschiedene Nicht-Harker-Maxima, oder in der asymmetrischen Einheit der Patterson-Raumgruppe Pmm 8 unabhängige. Weil den $3 \times 8 = 24$ Lage-Koordinaten der Maxima nur $2 \times 3 = 6$ Lage-Koordinaten gegenüberstehen, ergeben sich zwischen den Lage-Koordinaten der Nicht-Harker-Maxima Bedingungen, aus denen die Lage-Parameter der Atome bestimmbar sind. Man kann zeigen (BURZLAFF, noch nicht publiziert), daß sich die umständliche Untersuchung über das Koordinaten-Schema durch eine sehr viel einfachere Behandlung ersetzen läßt. Weil sich alle Raumgruppen, die zu einer und derselben Punktgruppe gehören, in dem parameterbehafteten Teil der Nicht-Harker-Maxima gleich verhalten, kann man diesen Anteil für alle solchen Raumgruppen gemeinsam behandeln. Die Unterschiede zwischen den einzelnen Raumgruppen entstehen durch die translativen Komponenten, sie lassen sich also durch die Lagekennstelle-Matrix erfassen. In der Punktgruppe $2/m\ 2/m\ 2/m$ treten in den Koordinaten-Differenzen nur Parameter-Summen oder Differenzen auf. Setzt man

$$\begin{aligned} x_1 - x_2 &= u & y_1 - y_2 &= v & z_1 - z_2 &= w \\ x_1 + x_2 &= u'' & y_1 + y_2 &= v'' & z_1 + z_2 &= w'' \end{aligned}$$

so erhält man eine vollständige Beschreibung aller Nicht-Harker-Maxima der Punktgruppe durch die Matrix

$$\begin{pmatrix} +u & +v & +w \\ +u & +v & -w \\ +u & +v & +w \\ +u & +v & -w \\ +u & +v & +w \\ +u & +v & -w \\ +u & +v & +w \\ +u & +v & -w \\ +u & +v & +w \\ +u & +v & -w \end{pmatrix}$$

jede Zeile dieser Matrix entspricht acht verschiedenen Maxima, weil das Vorzeichen auf jedem Parameter + oder - sein kann.

Da acht Zeilen vorhanden sind, werden also 64 Maxima beschrieben. Trennt man von der allgemeinen Punktlage der Raumgruppe Pbcn die translativen Anteile ab und ordnet sie in einer 3×8 Matrix an (Lagekennstellenmatrix), dann wird die Lage der Nicht-Harker-Maxima durch eine Matrix beschrieben, die aus der Summe der Lagekennstellenmatrix und der Patterson-Punktgruppematrix besteht:

$$\begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 1/2 & 1/2 & 0 \\ 0 & 0 & 1/2 \\ 1/2 & 1/2 & 1/2 \\ 0 & 0 & 0 \\ 1/2 & 1/2 & 0 \\ 0 & 0 & 1/2 \\ 1/2 & 1/2 & 1/2 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \frac{1}{2}u \pm v \pm w \\ \frac{1}{2}u \pm v \pm w \\ \frac{1}{2}u \pm v \pm w \\ \frac{1}{2}u \pm v \pm w \\ \frac{1}{2}u \pm v \pm w \\ \frac{1}{2}u \pm v \pm w \\ \frac{1}{2}u \pm v \pm w \\ \frac{1}{2}u \pm v \pm w \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{1}{2}u \pm v \pm w \\ 1/2 \frac{1}{2}u \pm 1/2 \frac{1}{2}v \pm w \\ \frac{1}{2}u \pm v \pm 1/2 \frac{1}{2}w \\ 1/2 \frac{1}{2}u \pm 1/2 \frac{1}{2}v \pm 1/2 \frac{1}{2}w \\ \frac{1}{2}u \pm v \pm w \\ 1/2 \frac{1}{2}u \pm 1/2 \frac{1}{2}v \pm w \\ \frac{1}{2}u \pm v \pm 1/2 \frac{1}{2}w \\ 1/2 \frac{1}{2}u \pm 1/2 \frac{1}{2}v \pm 1/2 \frac{1}{2}w \end{pmatrix}$$

In der Patterson-Funktion waren die Maxima so verteilt, daß die Mg-Atome spezielle Punktlagen besetzen müssen. Dadurch ergeben sich Überlappungen von Maxima, die die unmittelbare Interpretation über die Nicht-Harker-Maxima ebenfalls mehrdeutig machen. Deswegen wurde der zweite Weg angeschlagen. Nach einer Superposition auf das 2. Maximum des Si-Atoms mit anschließender Resymmetrisierung ließen sich die folgenden Parameter für die gesamte Struktur bestimmen:

	Si	Mg _I	Mg _{II}	O _I	O _{II}	O _{III}
X	0.206	0.0	0.50	0.137	0.381	0.118
Y	0.087	0.400	0.250	0.00	0.100	0.250
Z	0.071	0.250	0.250	0.268	0.080	0.080

Mit diesen Parametern lassen sich sämtliche Maxima des Patterson-Bildes deuten, das ist ein Beweis für die Richtigkeit der Raumgruppe Pbcn.

Den oben ausgeführten Parametern zufolge, besetzen das Si-Atom und die drei Sauerstoff-Atome die allgemeine Punktlage:

8 d 1: XYZ, $1/2 - X$, $1/2 - Y$, $1/2 + Z$; $1/2 + X$, $1/2 - Y$, $\bar{Z}$; $\bar{X}$, Y , $1/2 - Z$; $\bar{X}\bar{Y}\bar{Z}$, $1/2 + X$, $1/2 + Y$, $1/2 - Z$; $1/2 - X$, $1/2 + Y$, Z ; X , $\bar{Y}$, $1/2 + Z$;

Die zwei Mg-Atome besetzen die spezielle Punktlage mit der Punktsymmetrie 2.

4 c 2: $O_1 Y, 1/2$; $O_2 \bar{Y}, 3/4$; $1/2, 1/2 + Y, 1/4$; $1/2, 1/2 - Y, 3/4$;

Tabelle. Beziehungen zwischen Patterson-Koordinaten und Strukturparametern

Harkermaxima	Nicht-Harkermaxima		
$\pm 2X \pm 2Y \pm 2Z$	$u = X_2 - X_1$	$V = Y_2 - Y_1$	$W = Z_2 - Z_1$
$1/2 \pm 2X \ 1/2 \ 0$	$u' = X_2 + X_1$	$V' = Y_2 + Y_1$	$W' = Z_2 + Z_1$
$0 \pm 2Y \ 1/2$		Zahl der Maxima	Gewicht
$1/2 \ 1/2 \ 1/2 \pm 2Z$	$\pm u \pm v \pm w$	8	2
$1/2 \ 1/2 \pm 2Y \pm 2Z$	$1/2 \pm u \ 1/2 \pm v \pm w$	8	2
$\pm 2X \ 0 \ 1/2 \pm 2Z$	$u \pm v \ 1/2 \pm w$	8	2
$1/2 \pm 2X \ 1/2 \pm 2Y \ 1/2$	$1/2 \pm u \ 1/2 \pm v \ 1/2 \pm w$	8	2
	$\pm u \pm v \pm w$	8	2
	$1/2 \pm u \ 1/2 \pm v \pm w$	8	2
	$\pm u \pm v \ 1/2 \pm w$	8	2
	$1/2 \pm u \ 1/2 \pm v \ 1/2 \pm w$	8	2

Struktur-Verfeinerung

Die aus dem Patterson-Bild entnommenen Strukturparameter wurden mit dem gleichen "Least squares" Programm verfeinert wie Talk I und Talk II. Der beste erreichbare R-Wert mit individuellen Isotropen Temperatur-Faktoren beträgt 18,7 %. Rechnet man mit individuellen anisotropen Temperatur-Faktoren, so erreicht man einen R-Wert von 15,5 %. Die Hauptachsen der Schwingungsellipsoide erhalten dabei negative Werte, was physikalisch unmöglich ist. Dieser Effekt ist auf Absorption sowie allgemein auf die Qualität der Protoenstatit-Kristalle zurückzuführen.

Wie schon erwähnt wurde, sind sämtliche Reflexe auf den Weissenberg-Aufnahmen leicht bis stark verbreitert, was auf ein gestörtes Gitter oder einen sehr starken Mosaikbau schließen läßt. Wegen dieser Baufehler ist es nicht möglich die Struktur weiter zu verfeinern. Die Strukturparameter sind in Tabelle (12) angegeben. Die Struktur ist identisch mit der Struktur von J. V. SMITH (1959). Da SMITH einen anderen Nullpunkt gewählt hat, als in der vorliegenden Arbeit angegeben wurde, sind die von ihm angegebenen Parameter um den Betrag $Y = 1/2$ verschieden. Das von SMITH als Mg_2 angegebene Atom hat einen positiven statt eines negativen Y -Parameters. Es handelt sich offensichtlich um einen Druckfehler, denn in den entsprechenden Strukturprojektionen ist das richtig eingezeichnet.

Man erhält die Smith'schen Strukturparameter aus den in dieser Arbeit angegebenen Parametern auf folgende Art:

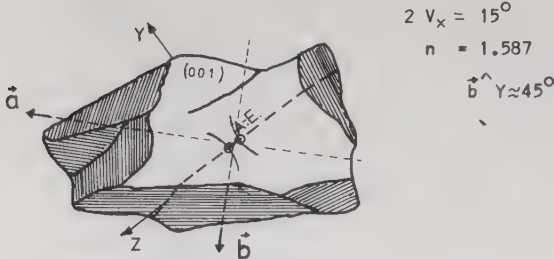
Man wendet auf die Parameter der Silizium- und Sauerstoff-Atome die Gleitspiegelebene b ($1/2 - X$, $1/2 + Y$, Z) und bildet $Y_{Sm.} = Y - 1/2$. Bei Mg_I erhält ohne Symmetrie-Anwendung das entsprechende Atom von Smith durch Bildung $Y_{S.} = Y - 1/2$ und bei Mg_{II} muß man die Gleitspiegelebene n ($1/2 + X$, $1/2 + Y$, $1/2 - Z$) anwenden unter Bildung wieder von $Y_{S.} = Y - 1/2$.

Optische Untersuchungen an röntgenographisch untersuchten Einkristallen und die metrischen Beziehungen zwischen TALK und Protoenstatit

Wie Abb. (10) zeigt, sind in dem in Protoenstatit umgewandelten Talkstück verschiedene Systeme von Rissen vorhanden. Um ein sicheres Bild über die optische Orientierung zu erhalten, muß man Spaltstücke untersuchen, deren kristallographische Orientierung man kennt. Bei der Untersuchung von Protoenstatit-Einkristallen findet man meistens kleine Leisten mit zwei nicht orthogonal zu einander stehenden Spaltsystemen. Zur Klärung des optischen Verhaltens wurde eine Vorrichtung gebaut, welche die optische Untersuchung des röntgenographisch justierten Kristalls erlaubt. Auf dem Drehtisch des Polarisationsmikroskops wird eine Achse montiert, die parallel zu diesem Tisch

steht. Auf diese Achse wird der röntgenographisch justierte Kristall mit dem Goniometer aufgebracht. Die Achse ist in ihrer Längsrichtung verschiebbar, so daß der Kristall in den Drehpunkt des Polarisations-tisches gebracht werden kann. Um den Kristall bei der optischen Abbildung frei drehen zu können, ohne an das Objektiv anzustoßen, werden Objektive mit großem Arbeitsabstand verwendet, z. B. Objektive vom Universal-Drehtisch. Als Kondensor wird ebenfalls der Kondensor des Universal-Drehtisches verwendet. Diese Vorrichtung gestattet bequem die polarisationsoptische Untersuchung von röntgenographisch justierten Kristallen sowie auch die Messung der Kristallgröße, da der Kristall um zwei Achsen gedreht werden kann, um die Goniometerachse und um die optische Achse des Mikroskops, auf diese Art ist jede Kante parallel zur Skala des Meßokulars zu bringen. Aus einem in Protoenstatit umgewandelten Talkspaltstück wurde eine kleine Leiste, wie in Abb. (11), isoliert und röntgenographisch untersucht. Die Justierung erfolgte in der $[010]$ -Richtung des Protoenstatits, welche in der Blattebene des Talkes liegt und nach dem beim Talk beschriebenen Verfahren leicht gefunden werden kann. Der röntgenographisch justierte Kristall wurde auf die vorher beschriebene Vorrichtung montiert. Die anschließende polarisationsoptische Untersuchung ergab, daß der Kristall gerade Auslöschung in der $[100]$ - und $[010]$ -Richtung des Kristalls zeigt, ein Befund, der völlig mit der röntgenographisch gefundenen Symmetrie übereinstimmt. Die Längsrichtung der Leiste bildet einen Winkel von 15° oder 30° mit der b_0 -Achse. Bezieht man die Auslöschung auf diese Richtung, so findet man natürlich schiefe Auslöschung. Die von LINDEMANN angegebene schiefe Auslöschung als Beweis der Monoklinität des Protoenstatits konnte in dieser Arbeit nicht beobachtet werden. Die zwei auftretenden Winkel von 15° und 30° zwischen $[010]$ und der Längsrichtung der Leisten entsprechen den Winkeln zwischen $[010]$ und $[120]$ bzw. $[110]$ im Talk, ein Hinweis, daß diese Spalttrichtungen vom Talk übernommen werden und nicht echte Spaltbarkeit des Protoenstatits darstellen.

Mit der gleichen Vorrichtung wurde ebenfalls ein röntgenographisch justierter Talk-Einkristall optisch untersucht. Die folgende Abbildung gibt die Beziehungen zwischen Kristall und optischer Indikatrix wieder.



Die Brechzahl wurde durch die Einbettungsmethode bestimmt. Dieses Ergebnis steht im Widerspruch zu den Angaben in den optischen Tabellen (z. B. in den Tabellen von W. E. TRÖGER).

Weissenberg- und Präzessions-Aufnahmen sowie polarisationsoptische Untersuchungen ergaben folgende Beziehungen zwischen Talk und Protoenstatit: $[100]_{\text{Talk}}$ steht parallel zu $[001]_{\text{Protoenstatit}}$, $[010]_{\text{Talk}}$ parallel zu $[010]_{\text{Protoenstatit}}$ und C_{Talk} parallel zu $[100]_{\text{Protoenstatit}}$. Die folgende Tabelle stellt die Gitterkonstanten der beiden Minerale gegenüber:

Tabelle

TALK		PROTOENSTATIT
$a_o = 5.29 \text{ \AA}$		$c_o = 5.32 \text{ \AA}$
$b_o = 9.17 \text{ \AA}$		$b_o = 8.77 \text{ \AA}$
$c_o^* =$		$a_o = 9.20 \text{ \AA}$
$c_o = 9.47 \text{ \AA}, d_{(001)} = 9.34 \text{ \AA}$		

Die (001)-Ebene des Talkes wird also in die (100)-Ebene des Protoenstatits überführt.

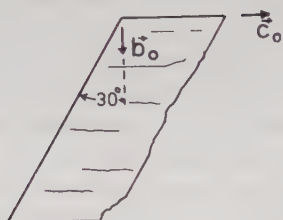


Abb.(11) .Protoenstatit-Leiste .

Tabelle (12). Strukturparameter vom Protoenstatit

	Mg _I	Mg _{II}	Si	O _I	O _{II}	O _{III}
X	0,500	0,000	0,2048(9)	0,1510(20)	0,3812(20)	0,1254(25)
Y	0,2607(24)	0,3996(20)	0,0932(10)	0,0211(30)	0,0987(30)	0,2534(31)
Z	0,250	0,2500	0,0697(15)	0,2967(40)	0,0845(35)	0,0719(40)
B	1,07	0,84	0,84	0,75	0,15	0,30

Beschreibung der Protoenstatit-Struktur

Protoenstatit ist ein Kettensilikat der Formel MgSiO_3 . Die $[\text{SiO}_3]^{2-}$ -Gruppen bilden Tetraeder, bei denen zwei benachbarte jeweils einen Eckpunkt gemeinsam haben. Die Verknüpfung der Tetraeder über die gemeinsamen Eckpunkte erfolgt so, daß die verknüpften Kanten nahezu eine Gerade bilden, sie bestimmt die Kettenrichtung. Bei jedem Tetraeder wird die verknüpfende Kante durch den dritten Tetraedereckpunkt zu einem Basisdreieck ergänzt. Die Basis-Dreiecke liegen alle in einer Ebene, sind aber längs der Kettenlinie mit ihren Spitzen abwechselnd rechts oder links gerichtet. Der vierte Eckpunkt jedes Tetraeders liegt oberhalb der Ebene der Basis-Dreiecke, die Tetraederspitzen sind also alle gleich orientiert.

Die $[\text{SiO}_3]^{2-}$ -Ketten sind parallel zur $[001]$ -Richtung angeordnet. Die Basis der Ketten liegt parallel zu der (100) -Ebene. Die Anordnung der Ketten längs der $[010]$ -Richtung ist derart, daß die Spitzen der Ketten abwechselnd nach $[100]$ und $[\bar{1}00]$ liegen. Die nächste Kettenschicht liegt so, daß die Kettensauerstoffe der Ausgangsschicht über die Kettensauerstoffe der unteren Schicht fallen, die Basisdreiecke liegen jedoch in Kettenrichtung, ebenso wie die Tetraederspitzen, auf Lücken (siehe Abb. (12)). Der Abstand zweier Kettenschichten ist $a_0/2$.

Durch diese Anordnung der Ketten entstehen Oktaederlücken, die von Mg-Atomen besetzt werden. Sie bilden gewinkelte Doppelketten, die ebenfalls wie die $[\text{SiO}_3]^{2-}$ -Ketten parallel zu der $[001]$ -Richtung verlaufen. Ihr Abstand ist ebenfalls $a_0/2$. Abb. (12) zeigt eine Projektion der Protoenstatit-Struktur längs der $[100]$ -Richtung. Eine gute Übersicht der strukturaufbauenden Elemente vermittelt die (001) Projektion Abb. (13).

Tabelle (13) gibt die interatomaren Abstände und Winkel für die Protoenstatit-Struktur, zusammengestellt für die Koordinationspolyeder, wieder. Bemerkenswert ist dabei das Verhalten der beiden symmetrisch nicht gleichwertigen Mg-Atome. Das Mg-Atom, das an der Spitze der Doppelkette sitzt, ist in seiner oktaedrischen Umgebung

der Sauerstoffe stark gestört. Das Oktaeder an der einspringenden Ecke der Doppelkette ist nur geringfügig deformiert. Interessant ist auch das koordinative Verhalten der Sauerstoffe. Während die Basis-sauerstoffe der $[\text{SiO}_3]^{2-}$ -Ketten eine Nachbarschaft von jeweils drei Kationen haben, besitzt der Spitzensauerstoff der $[\text{SiO}_3]^{2-}$ -Kette eine Vierer-Umgebung, nämlich drei Mg- und ein Si-Atom, die das Sauerstoffatom in der Art eines deformierten Tetraeders umgeben.

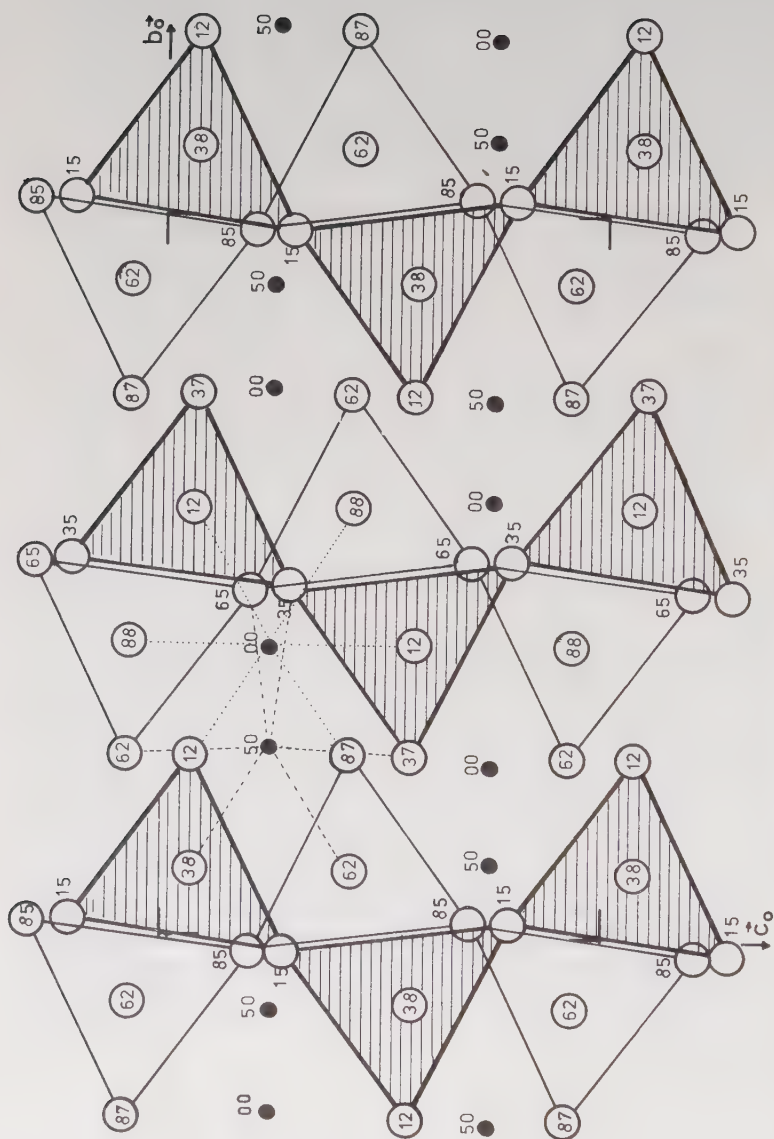


Abb. (12). [100] Projektion. Offene Kreise: Sauerstoff-Atome, volle Kreise: Mg-Atome.

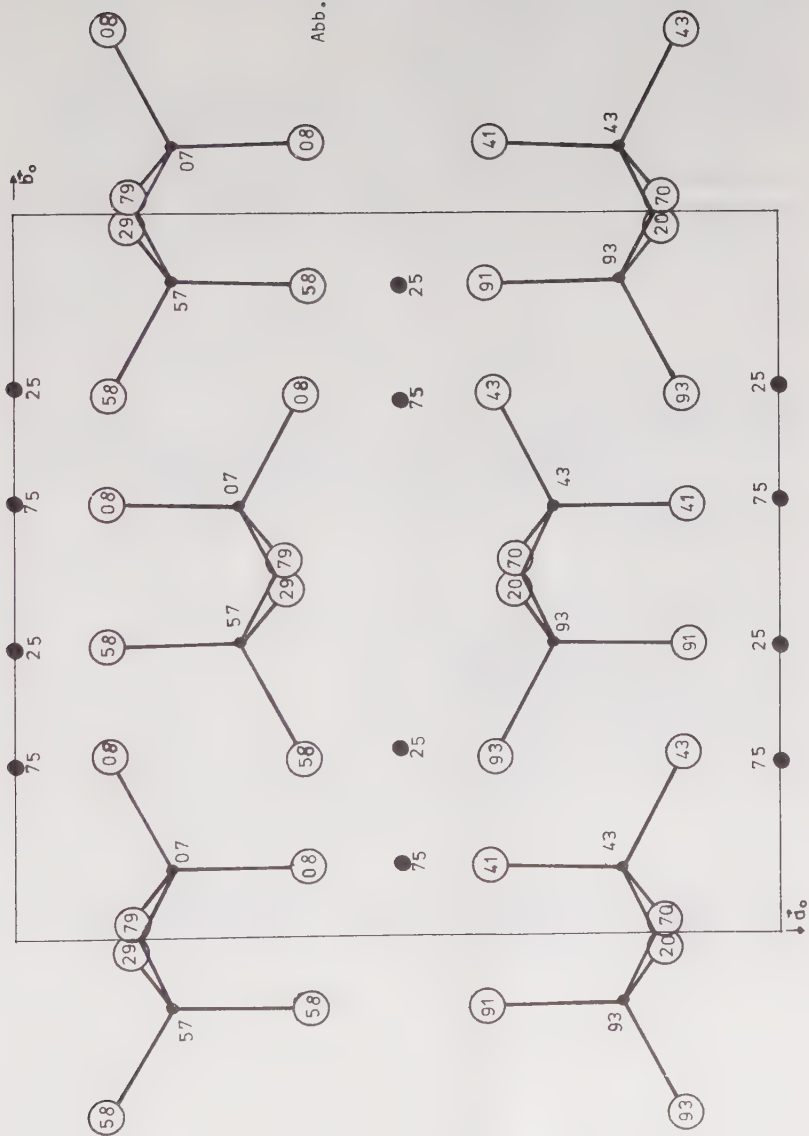
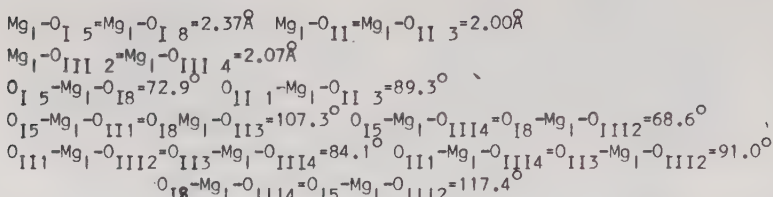


Abb. (13). Protoenstatit.
[001] Projektion.

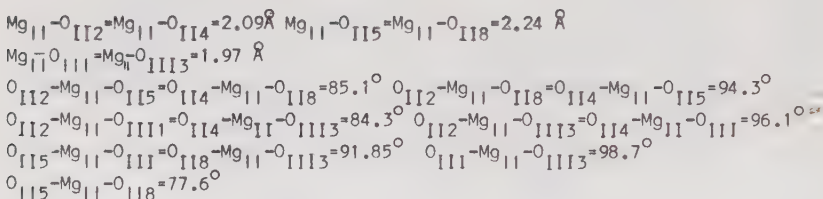
Tabelle(13). Interatomare Winkel und Abstände im Protoenstatit.

Mg_I :

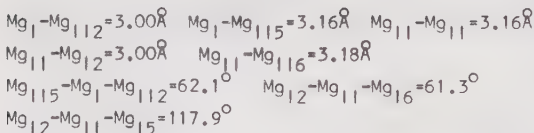


Koordinationspolyeder: Deformiertes Oktaeder. Eine Kante ist verdrillt.
Im Oktaeder sind Kettensauerstoffe aus zwei gegenüberliegenden Ketten beteiligt.

Mg_{II} :

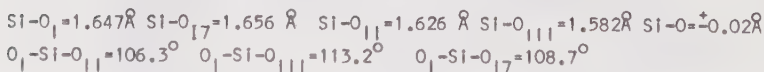


Leichtdeformiertes Oktaeder.



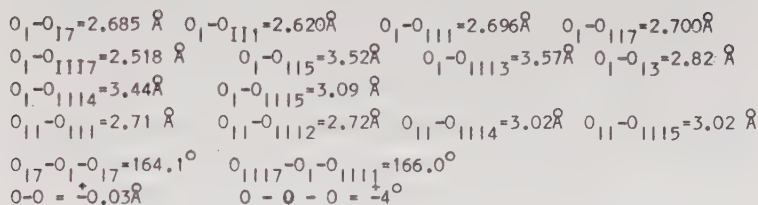
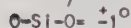
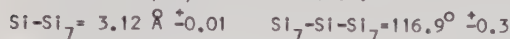
Die Kombination von Mg_I mit Mg_{II} ergibt Mg-Doppelketten.

Si:





Koordinationspolyeder: Tetraeder.



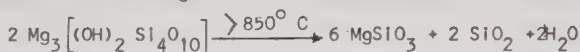
Die Nummerierung der Atome von eins bis acht gibt die Symmetrieeoperation an, die für den betreffenden Abstand verwendet wurde .

Nr.	Symmetr.Operation	Koordinaten		
1	1	x	y	z
2	$2_1 a$	$1/2+x$	$1/2-y$	$-z$
3	$2b$	$-x$	y	$1/2-z$
4	$2_1 c$	$1/2-x$	$1/2-y$	$1/2+z$
5	$(m_a) b$	$1/2-x$	$1/2+y$	z
6	$\bar{1}$	$-x$	$-y$	$-z$
7	$(m_b) c$	x	$-y$	$1/2+z$
8	$(m_c) n$	$1/2+x$	$1/2+y$	$1/2-z$

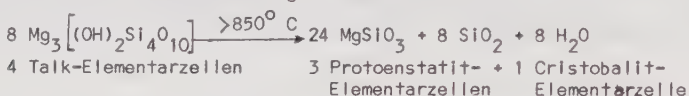
Strukturelle Beziehungen zwischen Talk und Protoenstatit

Aus der festen Orientierung der bei der Umwandlung oberhalb 850° C entstehenden Protoenstatit-Einkristalle zu den als Ausgangsmaterial dienenden Talk-Einkristallen sowie den metrischen Beziehungen zwischen den beiden kristallinen Phasen, die im vorigen Abschnitt besprochen wurden, kann man vermuten, daß zwischen beiden Mineralen strukturelle Beziehungen bestehen müssen.

Eine einfache Rechnung zeigt, daß die Umwandlung nicht zellenweise vor sich gehen kann. Zersetzt man den Inhalt einer Talkzelle, dann bekommt man die Beziehung:



In einer Protoenstatitzelle sind aber nicht sechs, sondern acht Formeleinheiten MgSiO_3 enthalten. Strebt man ein ganzzahliges Zellenverhältnis für den Umwandlungsprozeß an, dann muß man von vier Talk-Elementarzellen ausgehen. Dabei ist zu bemerken, daß dann genau acht Formeleinheiten SiO_2 durch den Zersetzungsprozeß frei werden, die gerade eine Cristobalit-Elementarzelle füllen. Nimmt man an, daß die Umwandlung wirklich zellenstöchiometrisch vor sich geht, dann ließe sich der Prozeß wie folgt formulieren:



Es sei ausdrücklich darauf hingewiesen, daß dies ein experimentell nicht belegbares Denkmodell ist.

Wenn der dargelegten Überlegung überhaupt Bedeutung zukommen soll, dann müssen die Bauelemente der Talk-Struktur ganz oder teilweise in der Struktur des Protoenstatits auftauchen. Es läßt sich nun zeigen, daß dies tatsächlich der Fall ist. Wir betrachten als erstes die Mg-Verteilung. In der Talk-Struktur bilden die Mg-Atome ein C-Netz. In der Protoenstatit-Struktur bilden die Mg-Atome gewinkelte Doppelketten, deren Laufrichtung unter Berücksichtigung der Gitterkonstanten-Relationen auch nach der Umwandlung parallel zu den ursprünglichen C-Netzen im Talk liegt. Projiziert man nun

die Mg-Doppelketten des Protoenstatits längs der a_0 -Achse des Protoenstatits in der (100)-Ebene, dann erkennt man, daß die Doppelketten sich geometrisch aus einem C-Netz herleiten lassen (siehe Abb. (14)), wenn man annimmt, daß das C-Netz in Richtung a_0 des Talkes in gewinkelte Doppelketten zerlegt wird, die abwechselnd um $1/4 d_{(001)}$ gehoben bzw. $1/4 d_{(001)}$ gesenkt werden. Da wegen des stöchiometrischen Zellenverhältnisses vier Talkzellen in drei Protoenstatit-Zellen übergehen, ist mit dem Absinken bzw. Aufsteigen eine Stauchung in Richtung b_0 -Talk verbunden, die durch die unterschiedlichen Höhen der Mg-Doppelketten möglich wird. Das ebene C-Netz wird also in ein stufenförmig gewelltes Netz aus Doppelketten umgewandelt. Geht man vom C-Netz allein aus, dann sind wegen der Hexagonalität als Zersetzungslinien auch die Richtungen $[110]$ und $[\bar{1}\bar{1}0]$ im Talk möglich. Wegen des Verlaufs der Doppelketten im Protoenstatit und der eindeutigen Beziehung der Basisvektoren beider Strukturen zueinander, scheiden aber diese Richtungen als Zerlegungslinien aus.

Es ist jedoch denkbar, daß das zweite in diesen Richtungen auftretende System von Spaltrissen mit diesen strukturellen Eigentümlichkeiten zusammenhängt.

Die Vorstellung von der Entstehung der Mg-Doppelketten aus den zentrierten hexagonalen Netzen des Talkes steht im Einklang mit dem Befund, wie er bei der Untersuchung der koordinativen Verhältnisse an den Mg-Atomen aufgezeigt wurde. Das Mg-Atom an der Spitze der gewinkelten Doppelnetze (Mg_I) hat von seinen ursprünglich sechs Nachbarn im C-Netz nur noch drei. Dadurch entsteht für eine oktaedrische Umgebung eines solchen Atoms eine Möglichkeit zur starken Deformation. Tatsächlich entsteht die vorgefundene Deformation durch Verdrillung der Oktaeder-Kante, die der Doppelkette abgewendet ist. Das Mg-Atom an der einspringenden Ecke der Doppelkette dagegen hat von seinen ursprünglich sechs Nachbarn noch fünf. Eine oktaedrische Umgebung dieses Mg-Atoms hat weniger Deformationsmöglichkeiten. Dies wird durch den experimentellen Befund bestätigt.

Die bisher dargelegte Vorstellung zieht zwei Folgerungen nach sich:

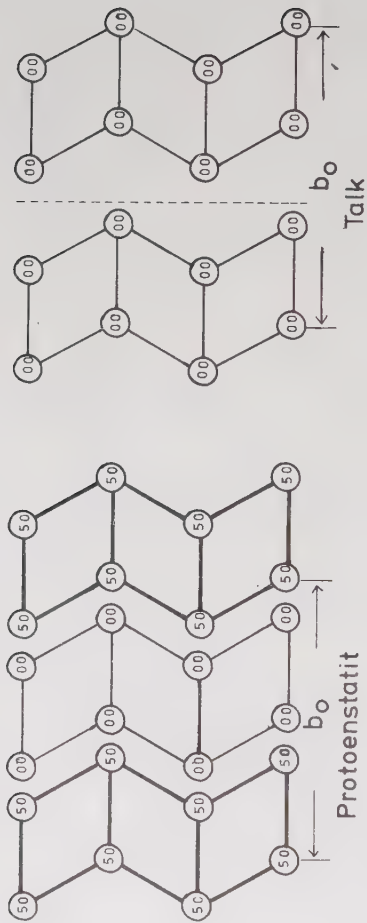


Abb. (14). Zerlegung eines Mg-C-Netzes in gewinkelten Doppelketten und Überführung in Mg-Verteilung des Protonenstatits. (Erklärung im Text)

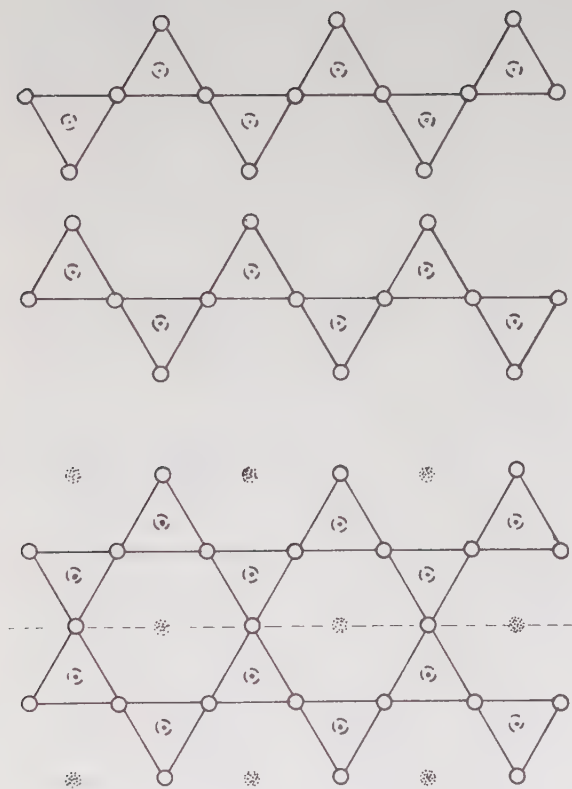


Abb. (15). Zerlegung einer $(\text{Si}_2\text{O}_5)^{2-}$, OH-Schicht in Ketten. (Erklärung im Text).

1. Aus der Talk-Struktur müssen durch den thermischen Prozeß Bestandteile entfernt werden, so daß die Zerlegung des C-Netzes in stufenförmige Doppelketten durchgeführt werden kann. Der hierfür nötige Raumbedarf wird durch den Austritt von H_2O und SiO_2 gegeben.
2. Durch dieselbe Verschiebung, wie sie in der Zerlegung des C-Netzes und deren Überführung in Doppelketten nötig ist, wird man die Zerlegung der tetraedrischen $[\text{Si}_2\text{O}_5]^{2-}$ -Netze in Pyroxen-Ketten verlangen müssen. Völlig analog zur Zerlegung des C-Netzes läßt sich das Tetraeder-Netz des Talkes längst der $[100]$ -Richtung in eckenverknüpfte Tetraeder-Ketten aufteilen, wenn man annimmt, daß die Richtungen zwischen den Tetraederbasis-Sauerstoffen, die keine Ketten in $\vec{a}_0$ -Richtung bilden, aufgebrochen und durch den bei der Entwässerung freiwerdenden Sauerstoff abgesättigt werden. (siehe Abb. (15)). Einmal ergeben sich an diesen Tetraederecken dann räumliche Schwierigkeiten, weil zwei Sauerstoffatome auf ein- und denselben Platz fallen würden. Außerdem ist aber sofort ersichtlich, daß bei diesem Prozeß nur jede zweite Bindung durch freiwerdenden Hydroxid-Sauerstoff besetzt werden kann. Deswegen ist es zur Erhaltung der chemischen Bilanz nötig, daß ein Teil der entstehenden $[\text{SiO}_3]^{2-}$ - Ketten in Form von SiO_2 ausgeschieden wird. Eine mögliche Erklärung für den Ausscheidungsmechanismus bietet die folgende Betrachtung. Wir denken uns die $[\text{Si}_2\text{O}_5]^{2-}$ -Doppelnetze in Tetraederketten zerlegt und in $\vec{a}_0$ -Richtung des Talkes projiziert, Abb. (16). Die Periode in $\vec{a}_0$ besteht aus zwei SiO_4 -Tetraedern ($[\text{Si}_2\text{O}_6]^{4-}$). In der $\vec{b}_0$ -Richtung denken wir uns zwei, in $\vec{c}_0$ -Richtung 4 Elementarzellen des Talkes aufgetragen. Dann erscheinen in jeder Talkzelle vier Pyroxen-Ketten, angedeutet durch Dreiecke, die sich in der $\vec{c}_0$ -Richtung entweder mit den Spitzen oder mit den Basisflächen gegenüberstehen. Entfernt man nun aus jeder Talkzelle eine der gedachten Pyroxenketten in einer solchen Weise, daß nach dem Herausnehmen die Spitze-Spitze bzw. Basis-Basis Orientierung erhalten bleibt und die entstehenden Lücken möglichst gleichmäßig verteilt sind, dann kommt man zur Verteilung

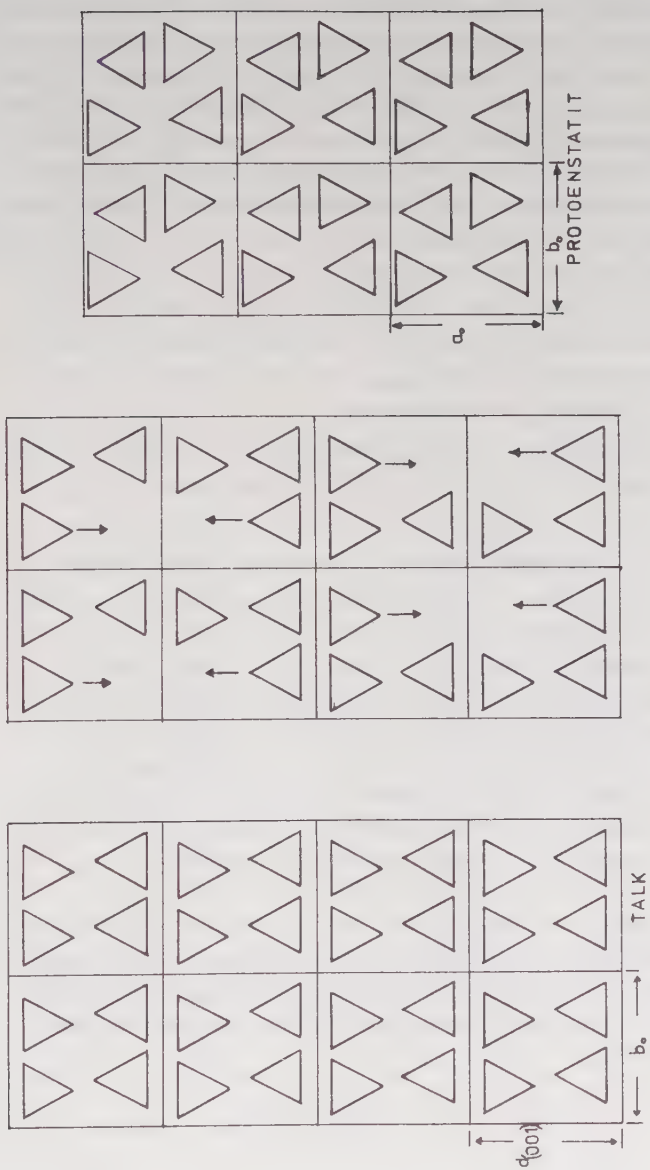


Abb. (16, 17, 18). Modellentwurf für den Umwandlungsmechanismus TALK $\rightarrow$ PROTOENSTATIT. (Erklärung im Text)

in der Abb. (17). In der ersten Zeile entfernt man in jeder Zeile die Kette links unten, in der zweiten Zeile in jeder Zeile die Kette links oben, in der dritten Zeile die Kette rechts unten, in der vierten Zeile die Kette rechts oben. Die verbliebenen Ketten werden dann bemüht sein, durch eine Verschiebung $\pm 1/4 d_{(001)}$, die entstandenen Lücken möglichst auszufüllen. Man wird also danach eine Verteilung in der Art der Abb. (18) vorfinden, das ist aber genau die Kettenverteilung im Protoenstatit, aus den vier Doppelschichten des Talkes werden drei Perioden im Protoenstatit. Durch diesen Mechanismus erreicht man also

1. Die Umwandlung von vier Talkzellen in drei Protoenstatitzellen.
2. Die Zerlegung des C-Netzes in gewinkelte Doppelketten durch die Verschiebung um $\pm 1/4 d_{(001)}$, wie sie in der Mg-Verteilung im Protoenstatit vorgefunden wird.
3. Die Behebung der räumlichen Behinderung, die sich bei der Zerlegung der $[\text{Si}_2\text{O}_5]^{2-}$ -Netze in $[\text{SiO}_3]^{2-}$ -Ketten ergab.
4. Die Erklärung der Verkürzung der b_o^* -Gitterkonstanten dadurch, daß die Pyroxen-Ketten in b_o^* -Richtung auf Lücken stehen.
5. Eine plausible Erklärung für den schlechten Kristallisationsgrad des Protoenstatits, denn bei dieser Art der SiO_2 -Ausscheidung wird noch eine verhältnismäßig kleine Zahl von Protoenstatit-Zellen in a_o -Richtung (c^* -Talk) das SiO_2 sich abscheiden müssen, etwa in Form von Cristobalit. Diese Auffassung wird gestützt dadurch, daß beim Umschlagen von Protoenstatit zu Klinoenstatit (100) bevorzugte Zwillings-ebene ist. In dieser Art ist daher auch die stabilisierende Wirkung von SiO_2 beim Protoenstatit zu verstehen.

Zum Schluß dieser Betrachtungen sei ausdrücklich darauf hingewiesen, daß für die Ableitung dieser Beziehungen von den Relationen zwischen den Mg-Doppelketten im Protoenstatit und den Mg-C-Netzen im Talk ausgegangen wurde. In Wirklichkeit wird man die Reihen-

folge sicher umkehren müssen; zuerst erfolgt die Entwässerung, dann die Zerlegung der $[\text{Si}_2\text{O}_5]^{2-}$ -Netze in $[\text{SiO}_3]^{2-}$ -Ketten, damit verbunden ist das Ausscheiden von SiO_2 , erst danach besteht die Möglichkeit zur Verschiebung der Ketten in $\vec{a}$ -Richtung des Protoenstatits, erst damit ist zwangsläufig die Zerlegung des Mg-C-Netzes in Doppelketten gekoppelt.

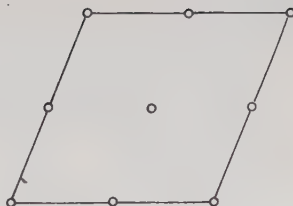
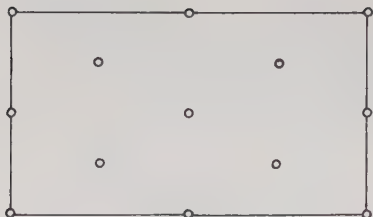
Für die Ableitung des oben beschriebenen Umwandlungsmechanismus ist es gleich, welche Strukturvariante des Talkes zugrunde gelegt wird.

Zusammenfassung

Für die Untersuchung der strukturellen Beziehungen zwischen Talk und Protoenstatit wurde die Struktur des Talkes neu bestimmt. Dabei konnte, in Übereinstimmung mit neusten englischen Untersuchungen, im Gegensatz zur älteren Literatur, der Talk als triklin mit Gitterkonstanten $a_0 = 5.29 \text{ \AA}$ $b_0 = 5.29 \text{ \AA}$ $c_0 = 9.47 \text{ \AA}$ $\alpha = 93.7^\circ$ $\beta = 95.15^\circ$ $\gamma = 120.0^\circ$ erkannt werden, außerdem wurde eine weitere Strukturvariante mit Gitterkonstanten $a_0 = 5.29 \text{ \AA}$ $b_0 = 5.29 \text{ \AA}$ $c_0 = 10.45 \text{ \AA}$ $\alpha = 96.35^\circ$ $\beta = 108.35^\circ$ $\gamma = 120.0^\circ$ gefunden und ihre Struktur bestimmt. Anhand von umgewandelten Talk-Einkristallen wurde die Struktur von Protoenstatit neu bestimmt, das Ergebnis stimmt mit der von J. V. Smith (1959) mitgeteilten Struktur überein. Über den geometrischen Vergleich der in den Strukturen auftretenden Bauverbände wurde ein Modell für den Umwandlungsmechanismus entwickelt.

A N H A N G

- 1.- Vergleich zwischen den Raumgruppen $C_{\bar{1}}$ und $P_{\bar{1}}$.
- 2.- Raumgruppe $Pb\bar{c}n$.
- 3.-Gemessene- und Berechnete-Intensitäten vom TALK I .
- 4.-Gemessene- und Berechnete-Intensitäten vom TALK II .
- 5.-Gemessene- und Berechnete-Intensitäten vom PROTOENSTATIT .



Vergleich zwischen den Raumgruppen C_{2v} und P_{2v}

Allgemeine Punktlagen:

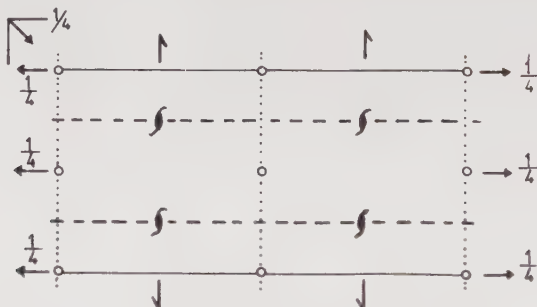
C_{2v} : XYZ; $\bar{X}\bar{Y}\bar{Z}$; $1/2 + X, 1/2 + Y, Z$; $1/2 - X, 1/2 - Y, -Z$;

P_{2v} : XYZ; $\bar{X}\bar{Y}\bar{Z}$

Symmetrie Zentren:

P_{2v} : a) 000; b) 001/2; c) 01/2 0; d) 1/2 00; e) 1/2 1/2 0; f) 1/2 0 1/2
g) 0 1/2 1/2; h) 1/2 1/2 0;

C_{2v} : a) 000, 1/2 1/2 0; b) 1/2 0 0, 0 1/2 0; c) 0 0 1/2 1/2 1/2 1/2;
d) 0 1/2 1/2; 1/2 0 1/2; e) 1/4 1/4 0; 3/4 3/4 0; f) 3/4 1/4 0;
1/4 3/4 0; g) 1/4 1/4 1/2; 3/4 3/4 1/2; h) 3/4 1/4 1/2; 1/4 3/4 1/2



Raumgruppe : Pbcn

Punktlagen:

8 d 1 X, Y, Z; $1/2 - X, 1/2 - Y, 1/2 + Z$; $1/2 + X, 1/2 - Y, \bar{Z}$;
 $\bar{X}, Y, 1/2 - Z$; $\bar{X}\bar{Y}\bar{Z}$; $1/2 + X, 1/2 + Y, 1/2 - Z$;
 $1/2 - X, 1/2 + Y, Z$; $X, \bar{Y}, 1/2 + Z$

4 c 2 0, Y 1/4; 0, $\bar{Y}$, 3/4; 1/2, $1/2 + Y$, 1/4; 1/2, $1/2 - Y$, 3/4

4 b $\bar{1}$ 0 1/2 0; 0, 1/2, 1/2; 1/2, 0, 0; 1/2, 0 1/2

4 a $\bar{1}$ 0, 0, 0; 0, 0, 1/2; 1/2, 1/2, 0; 1/2, 1/2, 1/2.

H	K	L	FO	FC	H	K	L	FO	FC	H	K	L	FO	FC
-6	0	-3	89	-129	-6	0	-2	248	274	-6	0	-1	44	56
-4	0	-8	74	49	-4	0	-7	146	164	-4	0	-6	57	71
-4	0	-5	119	-149	-4	0	-4	179	201	-2	0	-10	241	-181
-2	0	-9	225	220	-2	0	-8	278	265	-2	0	-7	120	-132
-2	0	-6	357	432	-2	0	-5	565	881	0	0	-11	236	227
0	0	-10	336	297	0	0	-9	227	198	0	0	-8	253	257
0	0	-7	453	451	0	0	-6	383	393	0	0	-5	380	-422
0	0	-4	135	-148	0	0	-3	479	947	0	0	-2	158	-256
0	0	-1	193	378	2	0	-11	144	145	2	0	-10	110	-101
2	0	-9	330	324	2	0	-8	160	173	2	0	-7	300	-329
2	0	-6	226	257	2	0	-5	603	732	2	0	-4	360	356
2	0	-3	544	484	2	0	-2	941	852	2	0	-1	450	404
2	0	0	441	-382	2	0	1	162	-126	2	0	2	523	509
2	0	3	85	76	2	0	4	117	125	4	0	-10	156	167
4	0	-9	68	70	4	0	-8	84	88	4	0	-7	378	456
4	0	-6	415	481	4	0	-5	119	-127	4	0	-4	165	154
4	0	-3	512	487	4	0	-2	406	-376	4	0	-1	52	-50
4	0	0	853	826	4	0	1	190	178	4	0	2	94	93
4	0	3	582	638	6	0	-6	28	36	6	0	-5	172	198
6	0	-4	35	47	6	0	-3	47	48	6	0	-2	336	354
6	0	-1	332	355	6	0	0	27	-36	6	0	1	40	56
-5	1	-6	55	-64	-5	1	-5	117	111	-5	1	-3	128	-142
-3	1	-8	69	-66	-3	1	-7	73	71	-3	1	-6	91	114
-3	1	-5	132	-152	-3	1	-4	50	-68	-1	1	-10	83	-75
-1	1	-9	54	49	-1	1	-8	81	80	-1	1	-7	81	-87
-1	1	-6	125	-134	-1	1	-5	121	135	-1	1	-4	90	104
-1	1	-3	268	-312	1	1	-10	80	67	1	1	-3	49	-36
1	1	-8	118	-113	1	1	-7	65	61	1	1	-6	176	171
1	1	-5	147	-153	1	1	-4	111	-111	1	1	-3	350	374
1	1	-2	143	-142	1	1	-1	418	-384	1	1	0	516	443
1	1	1	39	48	1	1	2	402	-395	1	1	3	186	180
3	1	-10	78	-74	3	1	-9	52	51	3	1	-8	91	92
3	1	-7	49	-42	3	1	-6	103	-108	3	1	-5	118	104
3	1	-4	103	89	3	1	-3	276	-249	3	1	-2	57	51
3	1	-1	293	261	3	1	0	283	-252	3	1	1	75	-74
3	1	2	288	270	3	1	3	107	-102	3	1	4	120	-124
3	1	5	141	153	5	1	-8	89	-85	5	1	-7	44	32
5	1	-6	72	85	5	1	-5	98	-96	5	1	-4	46	-46
5	1	-3	177	170	5	1	-2	49	-43	5	1	-1	164	-149
5	1	0	166	150	5	1	1	57	51	5	1	2	166	-156
5	1	3	52	57	-1	1	10	17	-22	3	1	6	27	36
3	1	8	10	-5	1	1	6	10	-13	1	1	8	10	7
1	1	10	17	23	-1	1	6	10	-5	-3	1	1	10	6
-3	1	6	10	-1	-3	1	8	10	-10	-3	1	10	14	19
-5	1	6	10	10	-5	1	1	10	-14	-5	1	-2	81	81
-5	1	-1	113	115	-5	1	0	184	-184	-5	1	2	178	175
-5	1	3	93	-95	-5	1	4	88	-91	-5	1	5	102	114
-5	1	7	84	-95	-3	1	-3	233	236	-3	1	-2	129	-133
-3	1	-1	220	-218	-3	1	0	316	300	-3	1	2	306	-277
-3	1	3	178	158	-3	1	4	115	111	-3	1	5	156	-163
-3	1	7	116	121	-3	1	9	99	-91	-3	1	11	78	78
-1	1	-2	99	123	-1	1	-1	402	379	-1	1	0	477	-440
-1	1	1	53	-59	-1	1	2	498	432	-1	1	3	218	-208
-1	1	4	130	-146	-1	1	5	214	208	-1	1	7	156	-144
-1	1	9	108	91	-1	1	11	74	-71	1	1	4	112	128
1	1	5	174	-196	1	1	7	148	131	1	1	9	86	-75
1	1	11	81	81	3	1	7	109	-102	3	1	9	61	61
5	1	4	86	92	5	1	5	79	-90	5	1	6	41	-48
-4	2	-8	58	-81	-4	2	-7	53	56	-4	2	-6	46	48
-4	2	-5	42	-41	-4	2	-4	59	-70	-4	2	-3	84	86

H	K	L	FO	FC	H	K	L	FO	FC	H	K	L	FO	FC
-2	2	-10	94	-129	-2	2	-9	64	-64	-2	2	-8	289	256
-2	2	-7	183	-173	-2	2	-6	159	-175	-2	2	-5	282	326
-2	2	-4	132	-148	0	2	-11	62	-40	0	2	-10	81	71
0	2	-8	120	-99	0	2	-6	187	169	0	2	-5	52	-45
0	2	-4	211	-209	0	2	-3	244	280	0	2	-2	78	88
0	2	-1	356	-477	2	2	-11	220	171	2	2	-10	201	-176
2	2	-9	51	-43	2	2	-8	325	308	2	2	-7	212	-210
2	2	-6	113	-137	2	2	-5	290	322	2	2	-4	221	-209
2	2	-3	69	-76	2	2	-2	230	193	2	2	-1	211	-159
2	2	0	198	138	2	2	1	89	-96	2	2	2	155	-131
2	2	3	334	323	0	2	-7	10	7	0	2	-9	10	-4
4	2	3	20	30	4	2	-2	20	-24	4	2	-7	28	-34
4	2	7	17	18	0	2	10	14	-19	-4	2	3	25	-35
2	2	4	194	-199	2	2	5	106	-107	4	2	-10	49	59
4	2	-9	53	52	4	2	-8	109	-116	4	2	-6	167	187
4	2	-5	110	-100	4	2	-4	157	-151	4	2	-3	278	246
4	2	-1	259	-230	4	2	0	188	172	4	2	1	82	82
4	2	2	163	-153	4	2	4	81	82	6	2	-5	81	111
6	2	-4	33	-32	6	2	-3	40	-43	6	2	-1	33	30
6	2	0	37	35	6	2	1	99	-98	-6	2	-2	102	100
-6	2	0	55	-55	-6	2	3	36	49	-6	2	4	48	-54
-6	2	5	47	-49	-6	2	6	118	145	-4	2	-2	55	63
-4	2	-1	192	-190	-4	2	0	64	63	-4	2	1	196	195
-4	2	2	229	-222	-4	2	4	234	230	-4	2	5	111	-117
-4	2	6	81	-83	-4	2	7	138	155	-4	2	8	33	-5
-4	2	9	89	-85	-2	2	-3	143	-151	-2	2	-2	279	282
-2	2	-1	169	-147	-2	2	0	45	34	-2	2	1	70	46
-2	2	2	199	-161	-2	2	3	302	287	-2	2	4	125	-127
-2	2	5	163	-183	-2	2	6	308	328	-2	2	7	151	-155
-2	2	8	222	-203	-2	2	9	285	259	-2	2	10	44	-40
-2	2	11	184	-135	0	2	1	224	280	0	2	2	313	-411
0	2	3	44	37	0	2	4	234	214	0	2	5	179	-157
0	2	6	103	-78	0	2	7	151	122	0	2	8	63	59
0	2	9	34	-68	0	2	11	103	78	2	2	6	314	337
2	2	7	163	-165	2	2	8	177	-156	2	2	9	242	210
2	2	10	82	-70	4	2	5	40	-42	4	2	6	72	-77
4	2	8	76	91	-3	3	-8	10	2	3	3	1	14	-19
3	3	-3	10	-3	5	3	-7	14	17	3	3	5	14	-20
3	3	8	10	4	-1	3	4	14	-21	-3	3	-1	10	-6
-3	3	3	10	-11	-5	3	0	10	9	-5	3	-3	14	13
-5	3	-5	341	335	-5	3	-4	349	357	-5	3	-2	62	75
-3	3	-9	359	345	-3	3	-7	217	219	-3	3	-6	428	503
-3	3	-5	45	-49	-3	3	-4	166	-205	-1	3	-11	452	489
-1	3	-10	35	37	-1	3	-9	47	-40	-1	3	-8	377	382
-1	3	-7	27	25	-1	3	-6	271	-290	-1	3	-5	363	430
-1	3	-4	515	679	-1	3	-3	289	326	1	3	-11	247	-190
1	3	-10	149	144	1	3	-9	331	318	1	3	-8	106	-104
1	3	-7	289	291	1	3	-6	766	910	1	3	-5	216	251
1	3	-4	20	-10	1	3	-3	458	502	1	3	-2	58	4
1	3	-1	604	-429	1	3	0	372	274	1	3	1	936	853
1	3	2	603	559	1	3	3	293	315	1	3	4	437	701
3	3	-11	374	445	3	3	-10	115	91	3	3	-9	65	66
3	3	-8	466	496	3	3	-7	151	186	3	3	-6	206	-274
3	3	-5	160	161	3	3	-4	341	345	3	3	-2	319	294
3	3	-1	911	821	3	3	0	531	502	3	3	2	231	231
3	3	3	286	314	3	3	4	180	-218	5	3	-8	188	-202
5	3	-6	324	448	5	3	-5	116	150	5	3	-4	63	64
5	3	-3	417	447	5	3	-2	227	239	5	3	-1	154	-161
5	3	1	240	260	5	3	2	50	63	-5	3	-1	220	254
-5	3	1	137	-152	-5	3	2	249	265	-5	3	3	394	436

H	K	L	FO	FC	H	K	L	FO	FC	H	K	L	FO	FC
-5	3	4	52	51	-5	3	5	137	170	-5	3	6	327	435
-3	3	-3	288	332	-3	3	-2	186	218	-3	3	0	545	531
-3	3	1	780	815	-3	3	2	273	260	-3	3	4	336	363
-3	3	5	112	133	-3	3	6	222	-282	-3	3	7	198	234
-3	3	8	455	482	-3	3	9	48	41	-3	3	10	150	119
-1	3	-2	516	577	-1	3	-1	765	831	-1	3	0	276	231
-1	3	1	532	-446	-1	3	2	36	49	-1	3	3	439	497
-1	3	5	265	296	-1	3	6	757	300	-1	3	7	266	251
-1	3	8	107	-99	-1	3	9	340	323	-1	3	10	120	127
-1	3	11	240	-205	1	3	5	333	382	1	3	6	303	-314
1	3	7	73	74	1	3	8	399	366	1	3	9	77	-58
1	3	10	67	72	3	3	6	434	512	3	3	7	204	200
3	3	9	362	364	5	3	4	311	377	5	3	5	331	312
-4	4	-4	113	139	-4	4	-3	145	-171	-4	4	-1	33	99
-4	4	0	59	-45	-4	4	3	83	82	-4	4	4	46	54
-4	4	5	155	-183	-4	4	6	92	111	-4	4	7	99	112
-4	4	8	190	-219	-4	4	9	53	53	-2	4	-4	123	-140
-2	4	-2	229	237	-2	4	-1	169	-166	-2	4	0	199	-190
-2	4	1	368	315	-2	4	2	53	-47	-2	4	3	286	-262
-2	4	4	204	131	-2	4	5	61	63	-2	4	6	181	-185
-2	4	8	125	108	-2	4	9	37	-33	-2	4	10	55	-54
0	4	1	194	136	0	4	2	279	-260	0	4	3	170	171
0	4	4	184	145	0	4	5	392	-334	0	4	6	241	203
0	4	7	211	160	0	4	8	365	-294	0	4	9	91	82
0	4	10	154	131	2	4	4	150	124	2	4	5	41	38
2	4	6	114	-99	2	4	7	41	-37	2	4	8	34	77
4	4	3	177	154	4	4	5	199	-199	4	4	6	151	144
4	4	7	107	87	-4	4	-7	84	99	-4	4	-6	208	-220
-4	4	-5	57	58	-2	4	-9	57	52	-2	4	-8	83	-79
-2	4	-7	55	-60	-2	4	-6	31	31	-2	4	-5	70	77
4	4	4	17	23	-2	4	7	25	33	-2	4	-3	10	-13
-4	4	-2	14	21	-4	4	0	30	-45	-4	4	1	10	-4
2	4	-10	10	7	4	4	-1	14	-16	4	4	-2	14	20
4	4	1	10	-8	0	4	-11	179	174	0	4	-10	37	31
0	4	-9	282	-232	0	4	-8	252	213	0	4	-7	139	133
0	4	-6	370	-334	0	4	-5	204	177	0	4	-4	134	127
0	4	-3	305	-303	0	4	-2	201	158	0	4	-1	30	-14
2	4	-11	67	-89	2	4	-9	95	87	2	4	-8	40	-37
2	4	-7	143	-149	2	4	-6	106	103	2	4	-5	98	117
2	4	-4	267	-247	2	4	-3	57	48	2	4	-2	338	279
2	4	-1	310	-245	2	4	0	98	-86	2	4	1	331	280
2	4	2	99	-31	2	4	3	144	-138	4	4	-9	224	-191
4	4	-8	146	153	4	4	-7	62	73	4	4	-6	164	-185
4	4	-5	88	105	4	4	-4	85	73	4	4	-3	103	-102
4	4	0	69	63	4	4	2	136	-143	6	4	-4	130	-179
6	4	-3	41	51	6	4	-2	110	124	6	4	-1	120	-124
6	4	2	53	-29	-5	5	-5	55	-81	-5	5	-3	132	28
-3	5	-7	109	-93	-3	5	-6	41	32	-3	5	-5	147	146
-3	5	-4	151	-138	-1	5	-9	88	-73	-1	5	-8	47	39
-1	5	-7	113	87	-1	5	-6	44	-37	-1	5	-5	134	-113
-1	5	-4	112	91	-1	5	-3	135	109	1	5	-10	44	-30
1	5	-9	96	68	1	5	-7	181	-150	1	5	-6	44	27
1	5	-5	205	192	1	5	-4	183	-181	1	5	-3	104	-89
1	5	-2	468	308	1	5	-1	209	-127	1	5	0	386	-214
1	5	1	406	259	1	5	2	36	29	1	5	3	221	-180
3	5	-9	79	-72	3	5	-7	84	78	3	5	-5	112	-112
3	5	-4	92	75	3	5	-3	158	121	3	5	-2	287	-209
3	5	0	309	241	3	5	1	223	-177	3	5	2	110	-100
3	5	3	226	202	3	5	4	66	-70	5	5	-7	117	-129
5	5	-6	33	28	5	5	-5	74	102	5	5	-4	94	-104

H	K	L	FO	FC	H	K	L	FO	FC	H	K	L	FO	FC
5	5	-3	46	-47	5	5	-2	148	150	5	5	-1	40	-46
5	5	0	123	-125	5	5	1	92	101	5	5	2	46	42
5	5	3	84	-100	1	5	-8	17	24	3	5	-1	10	9
3	5	-6	10	-5	3	5	-8	17	20	-3	5	2	10	-2
-5	5	2	22	-34	-1	5	9	17	-17	-5	5	-2	96	-108
-5	5	-1	40	44	-5	5	0	104	107	-5	5	1	110	-112
-5	5	3	125	136	-5	5	4	33	-34	-5	5	5	76	-80
-5	5	6	62	77	-3	5	-3	63	-64	-3	5	-2	260	237
-3	5	-1	120	-110	-3	5	0	190	-161	-3	5	1	265	227
-3	5	3	202	-168	-3	5	4	39	85	-3	5	5	66	58
-3	5	6	83	-77	-3	5	7	42	-28	-3	5	8	66	68
-3	5	9	45	46	-1	5	-2	292	-230	-1	5	-1	27	27
-1	5	0	407	271	-1	5	1	361	-231	-1	5	2	144	-104
-1	5	3	325	266	-1	5	4	96	-79	-1	5	5	166	-129
-1	5	6	181	150	-1	5	7	62	48	-1	5	8	128	-101
-1	5	10	76	56	1	5	4	30	81	1	5	5	106	87
1	5	6	109	-89	1	5	7	86	-71	1	5	8	78	61
1	5	9	53	46	3	5	5	123	-122	3	5	6	108	108
3	5	7	53	49	5	5	4	78	27	-2	6	6	17	-30
-4	6	-2	10	5	-4	6	1	22	-34	-4	6	5	22	-26
4	6	2	10	9	4	6	-1	10	10	-4	6	-5	213	-170
-4	6	-4	316	329	-4	6	-3	338	335	-2	6	-9	158	201
-2	6	-8	172	134	-2	6	-7	54	41	-2	6	-6	143	203
-2	6	-5	589	582	-2	6	-4	253	225	-2	6	-3	185	-172
0	6	-10	487	400	0	6	-9	48	33	0	6	-8	201	144
0	6	-7	636	519	0	6	-6	62	48	0	6	-5	340	-256
0	6	-4	339	273	0	6	-3	338	281	0	6	-2	39	-20
0	6	-1	434	434	2	6	-10	41	-30	2	6	-9	202	141
2	6	-8	150	135	2	6	-7	132	-110	2	6	-6	87	18
2	6	-5	527	612	2	6	-4	326	304	2	6	-3	57	-14
2	6	-2	995	747	2	6	-1	485	316	2	6	0	728	-496
2	6	1	379	281	2	6	2	493	376	2	6	3	204	-171
2	6	4	326	306	4	6	-8	130	87	4	6	-7	435	437
4	6	-6	159	176	4	6	-5	45	-25	4	6	-4	221	202
4	6	-3	192	178	4	6	-2	175	-137	4	6	0	527	447
4	6	1	302	258	4	6	3	357	370	-4	6	-1	326	300
-4	6	0	424	413	-4	6	2	123	-116	-4	6	3	213	199
-4	6	4	174	188	-4	6	6	205	212	-4	6	7	390	430
-2	6	-2	502	446	-2	6	-1	201	173	-2	6	0	592	-487
-2	6	1	579	454	-2	6	2	728	674	-2	6	3	40	-40
-2	6	4	386	381	-2	6	5	505	550	-2	6	7	94	-82
-2	6	8	147	136	-2	6	9	169	139	0	6	1	474	361
0	6	2	40	-31	0	6	3	415	308	0	6	4	239	225
0	6	5	368	-272	0	6	6	166	122	0	6	7	677	517
0	6	8	133	98	0	6	9	83	60	2	6	5	620	548
2	6	6	210	171	2	6	7	62	45	2	6	8	176	126
4	6	4	295	276	4	6	5	251	-136	-5	7	-2	87	126
-5	7	-1	85	93	-5	7	0	163	-182	-1	7	-8	93	88
-1	7	-7	78	-69	-1	7	-6	138	-130	-1	7	-5	185	164
-1	7	-4	37	23	-1	7	-3	262	-235	1	7	-9	92	-71
1	7	-8	57	-53	1	7	-7	76	61	1	7	-6	74	65
1	7	-5	96	-79	1	7	-4	58	-54	1	7	-3	192	178
1	7	-2	87	-48	1	7	-1	333	-210	1	7	0	360	205
1	7	1	84	62	1	7	2	329	-253	1	7	3	139	106
3	7	-7	75	-57	3	7	-6	90	-101	3	7	-5	126	140
3	7	-3	212	-187	3	7	-2	141	110	3	7	-1	144	110
3	7	0	215	-172	3	7	2	158	134	3	7	3	72	-66
3	7	4	64	-65	5	7	-5	61	-98	5	7	-4	58	-47
5	7	-3	130	140	5	7	-2	25	-25	5	7	-1	142	-136
5	7	0	136	135	5	7	1	33	51	-3	7	-3	123	119

H	K	L	FO	FC	H	K	L	FO	FC	H	K	L	FO	FC
-3	7	-2	79	-72	3	7	1	10	5	3	7	-4	10	7
1	7	6	10	-7	-1	7	8	20	-21	-1	7	6	10	10
-3	7	1	22	35	-3	7	6	14	-13	-3	7	-1	136	-130
-3	7	0	189	162	-3	7	2	208	-192	-3	7	3	102	84
-3	7	4	113	112	-3	7	5	124	-138	-3	7	7	140	113
-3	7	8	42	-34	-1	7	-2	202	166	-1	7	-1	201	140
-1	7	0	374	-257	-1	7	1	87	47	-1	7	2	258	176
-1	7	3	161	-129	-1	7	4	66	-56	-1	7	5	130	97
-1	7	7	95	-82	-1	7	9	78	98	1	7	4	145	124
1	7	5	210	-164	1	7	7	144	112	1	7	8	28	-25
3	7	5	87	76	3	7	6	40	38					

TALK I

AUFSTELLUNG : C_T .

H	K	L	FO	FC	H	K	L	FO	FC	H	K	L	FO	FC
0	6	0	393	380	2	-6	0	125	133	1	7	0	169	-172
3	-5	0	103	90	2	2	0	221	196	2	6	0	288	287
5	-1	0	122	120	4	2	0	207	207	4	0	0	915	887
4	-2	0	10	0	4	-4	0	68	64	3	5	0	35	33
0	10	0	66	-100	0	8	0	171	159	1	-9	0	472	445
1	-11	0	10	0	2	-10	0	41	-12	1	9	0	218	-200
2	10	0	77	97	2	8	0	120	-102	2	-8	0	182	-162
3	3	0	334	318	3	1	0	362	355	3	-1	0	289	-274
3	-3	0	634	602	2	4	0	134	129	2	0	0	529	-500
2	-2	0	176	162	3	-7	0	194	-189	3	-9	0	127	-146
3	7	0	82	68	4	8	0	212	234	4	6	0	346	329
4	-6	0	335	298	4	4	0	104	109	4	-8	0	30	23
3	9	0	384	423	6	0	0	95	-80	6	-2	0	42	-36
5	-3	0	10	12	6	-4	0	167	-167	6	-6	0	143	-236
5	-5	0	152	-142	5	7	0	25	-40	5	5	0	32	-35
5	-7	0	134	154	5	3	0	30	28	5	1	0	216	-205
7	1	0	133	146	3	-11	0	10	-14	7	-1	0	53	-69
7	-3	0	236	244	6	4	0	76	108	1	11	0	66	-72
6	2	0	85	-83	5	-9	0	254	246	4	-10	0	30	-35
0	12	0	164	168	7	3	0	363	324	7	-5	0	115	102
2	-12	0	88	-91	6	6	0	111	107	6	-8	0	109	-82
3	11	0	10	3	2	-4	0	89	-86	1	5	0	20	-15
1	3	0	733	687	1	1	0	528	-523	0	4	0	319	314
6	-10	0	85	-71	1	-1	0	477	475	8	4	0	30	-41
8	-6	0	221	218	6	8	0	47	-47	7	7	0	52	35
7	-9	0	81	84	5	-11	0	22	15	3	-13	0	10	-29
2	12	0	57	64	4	-12	0	231	213	1	13	0	63	-54
1	-13	0	10	23	8	2	0	46	35	8	0	0	118	114
8	-2	0	83	-77	7	-7	0	75	-70	8	-4	0	10	7
7	5	0	86	74	5	9	0	74	-45	1	-3	0	203	-166
1	-5	0	149	-142	0	2	0	406	418	4	10	0	47	-38
5	-7	1	10	-36	-5	-5	1	142	130	-5	7	1	44	-36
5	-9	1	40	65	5	3	1	137	143	-5	-3	1	311	289
0	-12	1	270	231	5	1	1	104	100	-5	-1	1	27	18
7	1	1	100	-90	-7	-1	1	20	24	7	-1	1	154	167
-7	1	1	120	-151	2	10	1	129	120	7	-3	1	361	358
-7	3	1	172	-196	6	4	1	30	27	-6	-4	1	98	-112
6	2	1	93	-87	-6	-2	1	120	109	-1	11	1	49	49
-5	9	1	281	257	1	-13	1	71	76	3	-7	1	71	70
-3	7	1	58	60	3	-9	1	369	326	-3	9	1	158	-225
3	7	1	92	-82	-3	-7	1	79	71	3	5	1	199	189
4	8	1	66	-53	-4	-8	1	88	-84	4	6	1	284	-247
-4	-6	1	521	488	4	-6	1	27	14	-4	6	1	88	94
4	4	1	250	-231	4	-8	1	124	-105	-4	8	1	157	160
4	-10	1	126	123	3	9	1	274	269	-3	-9	1	105	-158
6	0	1	290	265	-6	0	1	245	244	5	-1	1	219	-207
6	-2	1	66	64	-6	2	1	28	-15	5	-3	1	186	-164
6	-4	1	10	-33	-5	3	1	582	542	-6	4	1	163	171
6	-6	1	331	372	-6	6	1	218	228	5	-5	1	41	-33
-5	5	1	122	117	-5	-7	1	131	-152	5	5	1	107	-143
-4	10	1	92	-74	0	12	1	87	102	3	-11	1	114	118
7	3	1	132	130	-7	-3	1	95	110	7	-5	1	36	28
-7	5	1	100	-81	2	-12	1	77	-50	-2	12	1	157	158
-6	-6	1	211	-178	6	-8	1	145	126	5	7	1	117	107
1	11	1	40	-23	4	-12	1	292	295	-3	-11	1	78	-60
-2	2	1	84	-82	2	-4	1	303	-288	-2	4	1	334	313
-3	11	1	100	-81	-1	-5	1	278	263	1	3	1	400	377
-1	-3	1	972	960	-2	-12	1	32	-25	1	1	1	115	112
-1	-1	1	289	286	-9	1	1	76	75	1	-1	1	426	-422
-1	1	1	44	42	8	4	1	84	-82	-8	-4	1	111	98

H	K	L	FO	FC	H	K	L	FO	FC	H	K	L	FO	FC
8	2	1	48	-35	8	-6	1	10	13	-8	6	1	160	159
7	-9	1	165	156	-7	9	1	70	-47	-7	-7	1	74	58
6	8	1	17	6	-6	10	1	110	94	5	9	1	110	104
-5	11	1	10	27	4	10	1	41	-46	3	-13	1	10	-8
2	12	1	151	149	-4	12	1	45	45	3	11	1	45	63
-1	-13	1	10	-9	-8	-2	1	50	43	8	0	1	83	-67
1	-7	1	65	67	-1	7	1	88	-83	2	-6	1	252	244
-2	6	1	784	764	-1	-7	1	77	-76	1	5	1	170	-156
3	3	1	330	309	3	-5	1	199	195	-3	5	1	189	-180
2	6	1	731	708	-2	-6	1	192	-184	2	4	1	121	110
-5	1	1	139	126	-4	-4	1	113	102	4	2	1	71	-73
-4	-2	1	48	-48	4	0	1	10	12	-4	0	1	409	391
4	-2	1	258	-252	-4	2	1	290	280	4	-4	1	10	-17
-4	4	1	10	-2	-3	-5	1	272	-267	0	10	1	72	-92
0	-10	1	105	118	0	8	1	93	93	0	-8	1	205	-203
1	-9	1	27	40	-1	9	1	456	446	1	-11	1	60	-85
2	-10	1	144	-171	-2	10	1	205	213	-1	-11	1	127	129
1	9	1	55	-67	-1	-9	1	433	416	1	7	1	179	174
-2	-10	1	198	-234	2	8	1	14	40	-2	-8	1	10	-18
2	-8	1	109	95	-2	8	1	10	29	0	6	1	238	-233
-3	-3	1	40	-23	3	1	1	115	-109	-3	-1	1	137	-130
3	-1	1	318	308	-3	1	1	99	-93	3	-3	1	999	972
-3	3	1	10	-2	-2	-4	1	292	-281	2	2	1	348	-338
-2	-2	1	30	-20	2	0	1	35	-12	-2	0	1	325	305
2	-2	1	220	-188	-8	0	1	211	183	8	-2	1	57	-38
-8	2	1	136	118	7	-7	1	65	64	8	-4	1	48	40
-7	7	1	30	-29	-8	4	1	25	-7	-6	-8	1	10	-19
7	5	1	56	54	-7	-5	1	134	-109	6	6	1	277	233
-6	8	1	40	-44	-5	-9	1	263	245	6	-10	1	14	-23
1	-3	1	465	-441	-1	3	1	597	572	1	-5	1	251	-235
-1	5	1	289	277	0	-2	1	416	-469	0	0	1	435	437
5	-11	1	62	-52	0	-2	1	426	-469	0	2	1	123	122
-4	-10	1	44	38	0	-4	1	190	-173	0	4	1	173	-178
0	-6	1	238	236	2	6	2	277	266	-3	7	2	125	114
3	-9	2	67	60	-3	9	2	426	473	3	7	2	64	-68
-3	-7	2	157	-139	3	5	2	133	-143	-4	-8	2	103	-125
4	6	2	35	40	-4	-6	2	28	54	4	-6	2	192	-179
-4	6	2	22	49	4	4	2	123	106	4	-8	2	54	55
-4	8	2	168	-221	4	-10	2	52	-67	-3	-9	2	103	-122
6	0	2	195	187	-6	0	2	594	558	5	-1	2	10	11
6	-2	2	55	59	-6	2	2	22	-27	5	-3	2	233	208
6	-4	2	159	172	-6	4	2	47	65	-5	3	2	353	344
6	-6	2	534	635	-6	6	2	203	229	5	-5	2	180	174
-5	5	2	71	60	-5	-7	2	153	217	5	5	2	67	103
5	-7	2	160	-157	-5	-5	2	46	-49	-5	7	2	55	-107
5	-9	2	235	247	5	3	2	573	542	-5	-3	2	145	131
-7	-3	2	118	117	5	1	2	106	98	-7	-1	2	157	-198
7	-1	2	33	-38	-7	1	2	134	164	7	-3	2	66	73
-7	3	2	20	-3	-6	-6	2	114	130	-2	10	2	121	-104
6	4	2	46	-41	2	-12	2	311	272	-6	-4	2	84	-80
6	2	2	192	243	-6	-2	2	17	-12	0	-12	2	10	-4
-4	-10	2	43	37	4	8	2	148	-135	-3	-11	2	10	-7
3	9	2	10	4	-7	-5	2	10	10	7	1	2	36	-35
7	-5	2	153	-137	-7	5	2	33	-19	-1	-13	2	22	38
6	-8	2	10	-5	-5	-9	2	421	372	-1	5	2	77	-72
1	-7	2	240	-232	2	-6	2	999	970	-2	6	2	268	247
-1	-7	2	299	290	1	5	2	84	85	3	3	2	298	-298
3	-5	2	276	-262	-3	5	2	33	42	3	-7	2	184	172
-2	-6	2	567	525	2	4	2	143	-136	-5	-1	2	206	201
-5	1	2	207	-199	-4	-4	2	127	-126	4	2	2	93	-84

H	K	L	FO	FC	H	K	L	FO	FC	H	K	L	FO	FC
-4	-2	2	238	-240	4	0	2	383	385	-4	0	2	605	-581
4	-2	2	153	154	-4	2	2	220	-208	4	-4	2	10	31
-4	4	2	173	-171	-3	-5	2	183	188	0	8	2	282	-261
0	10	2	76	59	0	-10	2	10	25	-1	7	2	54	-48
1	-9	2	112	114	-1	9	2	52	-137	1	-11	2	10	20
2	-10	2	133	132	-1	-11	2	30	16	1	9	2	317	409
-1	-9	2	436	419	1	7	2	60	35	3	-11	2	72	-68
-2	-10	2	60	49	2	8	2	99	128	-2	-8	2	150	138
2	-8	2	139	131	-2	8	2	142	128	0	6	2	70	-74
0	-8	2	27	45	-3	-3	2	550	524	3	1	2	214	-212
-3	-1	2	258	-246	3	-1	2	50	51	-3	1	2	323	316
3	-3	2	363	350	-3	3	2	283	266	-2	-4	2	27	20
2	2	2	148	143	-2	-2	2	93	-79	2	0	2	595	575
-2	0	2	999	970	2	-2	2	233	210	1	11	2	35	39
-4	10	2	78	67	4	-12	2	10	9	-1	11	2	10	26
1	-13	2	85	-82	-2	2	2	175	-153	2	-4	2	308	293
-2	4	2	128	-120	-3	11	2	36	42	-1	-5	2	190	-177
1	3	2	770	771	-1	-3	2	272	254	-2	-12	2	318	300
2	10	2	159	-146	1	1	2	332	323	-1	-1	2	299	293
-9	1	2	66	-59	1	-1	2	137	-135	-1	1	2	449	-442
8	2	2	10	-12	8	-6	2	131	-119	-8	6	2	66	80
7	-9	2	95	-95	7	5	2	74	-77	-6	10	2	10	-1
-5	-11	2	70	73	5	9	2	132	123	-4	-12	2	10	2
-5	11	2	10	22	4	10	2	53	48	3	-13	2	10	21
-3	-13	2	10	-17	3	11	2	36	-29	-2	12	2	57	61
2	-14	2	112	97	0	12	2	157	150	0	-14	2	89	-73
-8	-4	2	57	-42	-8	-2	2	111	-98	8	0	2	226	215
-8	0	2	221	-180	8	-2	2	81	66	-8	2	2	30	3
8	-4	2	47	-42	7	-7	2	22	36	-7	7	2	79	79
-8	4	2	46	-44	-7	-7	2	70	-60	-6	-8	2	56	38
6	6	2	136	137	7	3	2	171	-140	-6	8	2	124	113
6	-10	2	80	66	5	7	2	32	-26	1	-3	2	498	468
-1	3	2	122	105	1	-5	2	356	338	0	-6	2	14	5
0	4	2	181	-184	0	-4	2	46	40	0	2	2	355	-357
0	-2	2	53	-54	-5	9	2	82	-59	0	0	2	286	-309
5	-11	2	10	11	2	6	3	54	81	-3	7	3	117	-112
3	-9	3	35	-8	-3	9	3	243	223	3	7	3	83	138
-3	-7	3	10	-12	3	5	3	77	-71	-4	-8	3	146	140
4	6	3	303	379	-4	4	3	186	170	-4	-6	3	328	325
4	-6	3	325	299	-4	6	3	507	470	4	4	3	181	172
4	-8	3	32	27	-4	8	3	28	-33	4	2	3	76	77
4	-10	3	113	-135	-3	-9	3	247	211	-6	-2	3	32	-27
-1	5	3	184	-171	1	-7	3	84	72	-2	4	3	161	-149
2	-6	3	72	-67	2	-8	3	221	-203	-1	-7	3	136	-136
1	5	3	112	104	3	3	3	60	53	3	1	3	217	215
-3	3	3	392	354	3	-5	3	10	-17	-3	5	3	108	98
3	-7	3	184	-179	-2	-6	3	210	189	2	4	3	39	-35
-5	-1	3	148	-144	-4	-4	3	10	25	-4	-2	3	246	243
4	0	3	724	723	-4	0	3	332	314	4	-2	3	99	91
-4	2	3	119	-112	4	-4	3	133	-121	-3	-5	3	164	160
0	6	3	621	591	0	8	3	109	109	0	-10	3	143	-139
-1	7	3	42	54	1	-9	3	336	291	-1	9	3	42	64
1	-11	3	111	137	0	-12	3	178	-158	2	-10	3	10	10
-1	-11	3	173	-230	1	9	3	20	-9	-1	-9	3	27	41
1	7	3	124	-119	-4	-12	3	123	-102	3	-11	3	84	-90
-2	-10	3	102	123	2	8	3	33	-65	-2	-8	3	88	-75
-2	6	3	193	-170	-2	8	3	45	-64	0	4	3	385	385
0	-8	3	114	108	-3	-3	3	999	994	-3	-1	3	313	298
3	-1	3	290	-283	-3	1	3	102	-108	3	-3	3	14	-3
-2	-4	3	327	311	2	2	3	215	216	-2	-2	3	200	173

H	K	L	FO	FC	H	K	L	FO	FC	H	K	L	FO	FC
2	0	3	27	9	-2	0	3	723	653	2	-2	3	81	-83
6	0	3	283	-353	-6	0	3	256	246	5	-1	3	174	153
-5	1	3	10	1	6	-2	3	163	-163	-6	2	3	101	90
5	-3	3	274	242	6	-4	3	74	-67	-6	4	3	187	-227
-5	3	3	30	48	6	-6	3	63	-133	-6	6	3	185	-167
5	-5	3	64	-61	-5	-7	3	27	25	-5	5	3	140	-124
5	5	3	70	77	5	-7	3	158	150	-5	-5	3	138	-136
-5	7	3	49	50	5	-9	3	344	364	5	3	3	284	281
-5	-3	3	213	-137	-7	-3	3	391	406	5	1	3	152	-144
-7	-1	3	81	92	-2	-12	3	368	331	-7	1	3	17	46
-7	3	3	269	253	-6	-6	3	303	330	-2	10	3	89	-86
2	-12	3	251	236	-6	-4	3	157	173	6	2	3	63	-85
0	10	3	36	28	-4	-10	3	78	-53	-3	-11	3	84	64
-7	-5	3	150	124	7	1	3	118	103	7	-1	3	93	-87
7	-3	3	156	161	7	-5	3	74	65	-7	5	3	85	66
6	4	3	48	-33	-1	-13	3	27	20	6	-8	3	134	-120
-5	-3	3	10	34	-4	10	3	33	36	4	-12	3	10	3
3	9	3	260	244	-1	11	3	66	-62	1	-13	3	27	-34
-2	2	3	380	363	2	-4	3	55	50	-1	-5	3	209	-201
3	-13	3	14	28	1	3	3	508	504	-1	-3	3	542	-509
2	10	3	27	28	1	1	3	253	-245	-1	-1	3	470	-467
-3	-13	3	93	-91	-9	-1	3	17	-19	1	-1	3	421	418
-9	1	3	46	-35	-8	-6	3	10	-8	-1	1	3	225	218
8	2	3	10	11	8	0	3	295	292	8	-6	3	118	115
-7	7	3	28	-21	-8	6	3	157	169	7	-9	3	39	-40
-6	-10	3	122	103	7	5	3	10	-4	6	6	3	39	103
-5	-11	3	113	-108	-3	11	3	41	32	2	-14	3	110	-88
1	11	3	10	-11	-8	-4	3	70	-50	-8	-2	3	10	18
0	-14	3	10	17	-8	0	3	25	30	8	-2	3	27	-16
-8	2	3	150	-125	8	-4	3	58	-46	7	-7	3	97	-80
-8	4	3	37	27	-7	-7	3	14	-22	-6	-8	3	17	22
7	3	3	41	46	-6	8	3	45	-28	6	-10	3	10	-10
5	7	3	56	-33	1	-3	3	999	973	-1	3	3	152	144
1	-5	3	10	-5	0	-6	3	583	650	0	-4	3	70	65
0	2	3	132	129	0	-2	3	462	475	-5	9	3	87	-80
0	0	3	999	999	5	-11	3	91	77	4	8	3	149	132
1	-3	4	618	562	-1	3	4	999	999	1	-5	4	324	-307
-5	9	4	173	165	5	-11	4	99	-88	0	0	4	138	-168
-4	-12	4	181	175	0	-2	4	249	-248	0	2	4	166	159
-4	8	4	30	-13	0	-4	4	205	-189	0	-6	4	950	964
-6	-10	4	33	-47	6	6	4	176	176	7	3	4	174	164
5	7	4	25	23	-3	11	4	20	-31	-2	-14	4	56	-73
2	10	4	100	101	-4	10	4	49	-46	-3	-13	4	98	96
2	-14	4	10	-6	1	11	4	10	-21	-1	11	4	51	37
-8	-4	4	49	38	-8	-2	4	128	109	-8	0	4	419	371
-8	2	4	115	103	7	-7	4	42	9	-7	-7	4	39	84
6	4	4	53	42	7	1	4	14	-20	-7	5	4	10	-14
-6	8	4	78	-73	6	-10	4	10	-18	-5	-11	4	10	-7
-9	-1	4	66	-67	1	-1	4	145	-137	-9	1	4	76	74
-8	-6	4	212	199	-1	1	4	166	151	8	0	4	80	84
8	-2	4	28	-30	8	-4	4	113	98	-8	4	4	64	63
8	-6	4	147	132	-7	7	4	73	-62	1	3	4	341	-333
-1	5	4	122	129	1	-7	4	234	224	2	2	4	393	-389
-2	4	4	132	181	2	-6	4	464	-436	2	-8	4	10	-2
-1	-7	4	215	-204	3	1	4	45	28	3	-1	4	141	133
3	-3	4	420	399	-3	3	4	263	-250	3	-5	4	297	289
3	-7	4	45	-45	-2	-6	4	608	-579	-4	-4	4	28	-17
-4	-2	4	80	73	4	0	4	22	21	-4	0	4	488	447
4	-2	4	140	-137	-4	2	4	253	252	4	-4	4	96	85
-3	-5	4	299	-301	0	-10	4	67	58	0	8	4	149	189

H	K	L	FO	FC	H	K	L	FO	FC	H	K	L	FO	FC
0	6	4	302	294	-1	7	4	74	71	1	-9	4	20	-7
1	-11	4	59	-84	0	-12	4	245	281	2	-10	4	84	-76
2	-12	4	44	61	-1	-11	4	118	150	-1	-9	4	424	408
1	7	4	10	11	1	5	4	75	-55	3	-11	4	152	182
-2	-10	4	127	-119	-2	-8	4	149	-139	-2	6	4	89	76
-2	8	4	52	-122	0	4	4	207	-198	0	-8	4	70	-68
-3	-3	4	458	438	-3	-1	4	37	27	-3	1	4	171	-158
-2	-4	4	287	-268	-2	-2	4	301	-280	2	0	4	299	284
-2	0	4	404	380	2	-2	4	248	-235	-7	-9	4	214	131
7	-9	4	201	197	-7	3	4	25	25	-2	10	4	155	141
7	-5	4	83	79	-6	-8	4	102	-76	-6	6	4	28	36
6	-8	4	79	82	-1	-13	4	43	-37	-5	-9	4	22	27
5	5	4	72	-53	4	-12	4	252	223	3	9	4	246	245
-2	2	4	231	-219	2	-4	4	303	-290	-1	-5	4	369	353
3	-13	4	72	-66	-1	-3	4	20	43	1	1	4	74	-61
-1	-1	4	56	53	-7	-3	4	137	141	-5	-1	4	103	-89
-7	-1	4	103	128	-2	-12	4	32	-5	2	8	4	62	-50
-7	1	4	121	-152	-6	-6	4	122	-219	-6	-4	4	10	-12
1	9	4	10	22	6	2	4	153	-151	-1	9	4	271	236
1	-13	4	134	118	-5	7	4	46	35	-4	8	4	201	184
0	10	4	79	-53	-3	9	4	25	12	0	-14	4	75	71
-7	-5	4	112	-108	7	-1	4	100	86	7	-3	4	351	320
4	4	4	244	-249	4	-8	4	10	9	4	2	4	71	57
4	-10	4	140	166	-3	-11	4	30	-15	-3	-9	4	155	143
-6	-2	4	32	-26	6	0	4	145	162	-6	0	4	10	26
5	-1	4	118	-108	-5	1	4	173	161	6	-2	4	76	109
-6	2	4	10	-15	5	-3	4	25	-8	6	-4	4	71	-122
-6	4	4	87	35	-5	3	4	492	465	6	-6	4	37	12
5	-5	4	125	-119	-5	-7	4	203	-224	-5	5	4	17	24
5	-7	4	59	58	-5	-5	4	142	138	5	-9	4	64	-74
-4	-10	4	10	-26	5	3	4	105	-221	-5	-3	4	147	139
5	1	4	10	-6	2	6	4	162	150	2	4	4	108	102
-3	5	4	33	-40	-3	7	4	53	-62	3	-9	4	439	474
3	7	4	44	28	-3	-7	4	210	194	3	5	4	102	96
3	3	4	646	613	-4	-8	4	33	-26	4	6	4	62	-51
-4	4	4	33	41	-4	-6	4	598	567	4	-6	4	590	548
-4	6	4	434	418	2	6	5	155	216	2	4	5	58	46
-3	5	5	92	-75	3	-7	5	209	192	-3	7	5	74	143
3	-9	5	485	450	3	5	5	47	26	3	3	5	205	203
-4	-8	5	66	-58	4	-4	5	115	124	-4	4	5	253	-243
-4	-6	5	47	42	4	-6	5	98	117	4	4	5	28	24
-4	6	5	76	-161	4	-8	5	66	-48	4	2	5	55	-45
4	-10	5	35	37	-3	-11	5	99	-101	4	0	5	143	-125
-3	-9	5	10	32	-6	-2	5	25	26	6	0	5	445	462
5	-1	5	77	-68	-6	0	5	192	183	6	-2	5	135	139
-5	1	5	85	-78	-6	2	5	142	-136	5	-3	5	250	242
6	-4	5	81	98	-6	4	5	88	122	-5	3	5	383	356
6	-6	5	326	355	-5	-9	5	265	266	5	-5	5	125	111
-5	-7	5	115	122	-5	5	5	122	171	5	-7	5	203	-221
-5	-5	5	66	58	5	-9	5	139	-145	-4	-10	5	116	133
5	3	5	194	209	-5	-3	5	607	583	5	1	5	120	147
-7	-3	5	200	-222	-5	-1	5	183	173	-7	-1	5	118	-141
-7	1	5	17	36	-6	-6	5	191	130	-1	-13	5	22	-19
-6	-4	5	186	-181	-1	9	5	129	-97	1	-13	5	77	-67
-5	7	5	30	-9	4	6	5	55	73	0	-14	5	40	-50
-4	8	5	94	-84	3	7	5	82	-66	-7	-5	5	65	-48
7	-3	5	39	51	-7	3	5	22	35	-6	-8	5	37	30
6	2	5	172	152	2	-14	5	67	73	6	-8	5	56	50
1	9	5	333	317	4	-12	5	71	-67	-3	-13	5	14	25
2	-4	5	118	111	-3	9	5	280	274	-1	-5	5	57	-53

H	K	L	FO	FC	H	K	L	FO	FC	H	K	L	FO	FC
3	-13	5	20	11	-1	-3	5	583	560	1	1	5	204	198
2	8	5	74	55	1	-3	5	436	426	-1	-1	5	263	259
-9	-1	5	73	55	1	-1	5	175	-176	-8	-6	5	10	-4
-1	1	5	229	-229	8	-2	5	10	3	8	-4	5	17	-28
-8	4	5	96	-84	8	-6	5	85	-61	-7	7	5	62	49
-7	-9	5	88	87	7	-9	5	191	180	7	3	5	27	-31
-6	8	5	41	48	5	7	5	10	11	5	-13	5	73	-78
-5	9	5	57	53	4	8	5	119	-110	-2	-14	5	98	88
-4	10	5	10	1	-2	10	5	46	-54	3	9	5	156	-138
0	10	5	17	11	-8	-4	5	17	13	-8	-2	5	135	-117
1	-15	5	73	-55	-8	0	5	73	79	-8	2	5	33	46
7	-7	5	85	75	-6	-10	5	64	-51	-7	-7	5	10	-19
6	4	5	10	33	7	1	5	74	-70	7	-1	5	30	25
-6	6	5	268	229	7	-5	5	133	-106	-7	5	5	45	-37
6	-10	5	10	-15	-5	-11	5	148	127	5	5	5	10	-21
1	3	5	28	3	-1	3	5	527	530	1	-7	5	275	-264
2	2	5	147	143	-2	2	5	151	-146	-2	4	5	44	39
2	-6	5	609	563	2	-8	5	215	205	-1	-7	5	282	272
3	1	5	174	-179	3	-1	5	130	125	-3	1	5	151	149
3	-3	5	194	174	-3	3	5	22	-35	3	-5	5	188	-176
-2	-8	5	203	189	-2	-6	5	569	544	-4	-4	5	67	58
-4	-2	5	298	-296	-4	0	5	210	-206	4	-2	5	10	12
-4	2	5	82	-78	-3	-7	5	115	-110	-3	-5	5	57	64
0	-10	5	129	129	0	8	5	194	-181	0	6	5	14	28
-1	5	5	81	78	-1	7	5	71	-91	1	-9	5	193	-171
1	-11	5	101	-106	0	-12	5	166	164	2	-10	5	10	16
2	-12	5	265	271	-1	-11	5	110	108	-1	-9	5	562	515
1	7	5	48	109	1	5	5	92	-88	3	-11	5	17	-12
-2	-12	5	66	73	-2	-10	5	10	2	-2	6	5	201	163
-2	8	5	47	57	0	4	5	217	-222	0	-8	5	20	10
-3	-3	5	30	-14	-3	-1	5	238	-227	-2	-4	5	123	-118
-2	-2	5	171	172	2	0	5	999	999	-2	0	5	833	803
2	-2	5	376	368	1	-5	5	202	192	0	-6	5	301	313
0	-4	5	314	308	0	2	5	152	-149	0	-2	5	161	-164
0	0	5	491	-493	5	-11	5	33	-23	-4	-12	5	345	312
3	1	6	36	27	2	6	6	62	-32	2	4	6	89	-81
-3	3	6	645	598	-3	5	6	17	14	3	-7	6	62	-64
-3	7	6	14	8	3	-9	6	66	85	3	5	6	27	-74
3	3	6	52	69	4	-2	6	88	90	-4	-8	6	10	11
-4	2	6	152	-144	4	-4	6	244	-227	-4	4	6	184	168
-4	-6	6	201	-174	4	-6	6	208	210	4	4	6	160	169
-4	6	6	81	101	4	-8	6	32	-40	4	2	6	74	-82
4	-10	6	136	-173	-3	-11	6	94	121	4	0	6	147	141
-3	-9	6	337	317	-6	-2	6	89	90	5	-1	6	130	130
-6	0	6	211	193	6	-2	6	200	-209	-5	1	6	89	-73
-6	2	6	154	209	5	-3	6	591	551	6	-4	6	10	35
-6	4	6	123	-119	6	-6	6	99	-87	-5	3	6	265	-230
5	-5	6	52	29	-5	-3	6	10	-8	-5	5	6	36	-60
-5	-7	6	108	109	1	1	6	10	4	-1	3	6	150	-133
1	-7	6	47	-40	2	2	6	248	263	2	0	6	349	365
-2	2	6	403	399	2	-4	6	133	122	2	-6	6	206	172
-1	-7	6	10	-14	1	3	6	450	430	-3	-3	6	382	370
-3	-1	6	107	99	3	-1	6	172	-170	-3	1	6	53	42
3	-3	6	327	-327	3	-5	6	116	-112	-2	-8	6	36	35
-2	-6	6	845	811	-4	-4	6	10	13	-4	-2	6	131	131
-4	0	6	382	380	-3	-7	6	140	-136	-3	-5	6	212	211
0	-10	6	141	-141	0	6	6	430	429	0	4	6	324	316
-1	5	6	78	-66	-1	7	6	37	-42	1	-9	6	374	331
1	-11	6	179	177	0	-12	6	141	-233	2	-10	6	10	6
2	-12	6	347	356	-1	-11	6	218	-217	-1	-9	6	52	-45

H	K	L	FO	FC	H	K	L	FO	FC	H	K	L	FO	FC
1	7	6	10	-19	1	5	6	71	53	-2	10	6	72	-76
3	-11	6	144	-184	-2	-12	6	264	258	-2	-10	6	44	38
-2	4	6	130	-119	-2	6	6	89	70	2	-8	6	122	-113
0	2	6	98	-87	0	-8	6	62	-65	-2	-4	6	332	321
-2	-2	6	184	177	-2	0	6	473	455	2	-2	6	158	-152
5	-7	6	34	94	-5	-5	6	176	-177	5	-9	6	225	221
-4	-10	6	30	-52	-5	-3	6	223	234	5	1	6	27	-29
-7	-3	6	87	94	-5	-1	6	10	-16	-7	-1	6	10	-20
-7	1	6	66	55	-6	-6	6	609	740	-2	8	6	45	17
-1	-13	6	114	86	-6	-4	6	160	157	5	3	6	171	159
1	-13	6	112	-88	0	8	6	57	55	0	-14	6	39	-34
-7	-5	6	157	133	-7	3	6	400	361	-6	-8	6	110	95
6	0	6	35	40	2	-14	6	42	-42	6	-8	6	99	-73
-4	8	6	74	-62	4	-12	6	159	-130	-3	-13	6	161	-138
-1	9	6	106	-98	3	7	6	39	30	-3	9	6	203	198
3	-13	6	104	97	-1	-5	6	309	-290	-1	-3	6	10	-15
2	8	6	27	13	-1	-1	6	188	-180	1	-1	6	192	191
-8	-6	6	136	-118	-1	1	6	14	-11	1	-3	6	812	836
7	1	6	28	28	8	-4	6	102	-90	-8	4	6	37	8
7	-9	6	64	82	-7	-9	6	147	145	6	4	6	71	-71
5	-13	6	10	-9	-2	-14	6	10	-13	4	-14	6	27	16
-1	-15	6	138	148	1	9	6	211	203	0	10	6	74	68
-8	-4	6	10	1	-8	-2	6	50	-31	1	-15	6	125	115
-8	0	6	54	75	-7	5	6	10	5	7	-7	6	42	-43
-8	2	6	142	-125	-6	-10	6	71	58	-7	-7	6	96	-81
6	2	6	10	9	7	-1	6	79	-79	7	-3	6	166	-136
7	-5	6	30	19	-6	6	6	157	155	-5	-11	6	121	-108
6	-10	6	50	31	5	5	6	76	66	1	-5	6	126	116
-5	7	6	69	-59	5	-11	6	148	137	0	0	6	466	451
0	-2	6	248	250	-4	-12	6	28	21	0	-4	6	144	-145
4	6	6	360	341	0	-6	6	25	11	3	1	7	36	87
3	-1	7	36	-42	2	4	7	10	3	-3	3	7	275	268
2	2	7	280	-276	-3	5	7	84	108	3	-7	7	129	-114
3	-9	7	47	81	-3	-7	7	220	209	3	3	7	444	492
4	-2	7	10	9	-4	-8	7	17	19	-4	2	7	129	131
4	-4	7	95	80	-4	4	7	114	123	-4	-6	7	210	198
4	-6	7	591	550	4	-8	7	139	135	4	2	7	69	132
4	-10	7	58	60	-3	-11	7	78	75	4	0	7	174	149
-4	0	7	716	683	-3	-9	7	607	564	-6	-2	7	133	-136
-6	0	7	147	-194	-5	1	7	104	99	-6	2	7	10	16
5	-3	7	158	131	6	-4	7	39	-37	-5	3	7	22	10
5	-5	7	132	-152	-5	-9	7	170	-204	-5	-7	7	174	-183
5	-7	7	111	167	5	-9	7	123	121	-5	-5	7	44	44
-4	-10	7	117	-156	-5	-3	7	84	101	5	1	7	74	-69
-7	-3	7	246	237	-5	-1	7	128	-111	-7	-1	7	85	87
2	6	7	96	-78	-6	-6	7	30	-7	-1	-13	7	59	-40
-6	-4	7	66	85	1	7	7	53	-32	-1	7	7	103	92
-5	5	7	77	-54	1	-13	7	142	129	4	4	7	149	-144
-4	6	7	256	222	3	5	7	14	13	0	8	7	132	117
-3	7	7	57	-37	0	-14	7	88	83	-7	-5	7	28	-43
-2	8	7	78	-54	-7	1	7	48	-49	-6	-8	7	137	-114
6	-2	7	25	9	-6	4	7	10	-4	2	-14	7	10	-24
6	-6	7	111	-91	4	-12	7	356	312	1	1	7	129	-121
1	-1	7	67	67	-1	1	7	158	149	1	-5	7	192	-187
1	-7	7	281	275	2	0	7	123	-119	-2	0	7	374	-355
2	-2	7	242	-247	-2	2	7	187	-177	2	-4	7	134	-132
2	-6	7	142	-138	-1	-7	7	221	-218	-3	-5	7	157	-164
-3	-3	7	265	250	-3	-1	7	116	105	-3	1	7	123	-116
3	-3	7	232	223	3	-5	7	231	222	-2	-8	7	227	-221
-2	-6	7	35	-31	-4	-4	7	179	-180	-4	-2	7	142	144

H	K	L	FO	FC	H	K	L	FO	FC	H	K	L	FO	FC
0	-10	7	48	-43	0	6	7	282	326	0	4	7	75	-69
-1	3	7	321	302	-1	5	7	28	-13	1	-9	7	577	540
1	-11	7	10	1	0	-12	7	393	477	2	-10	7	65	52
2	-12	7	87	-100	-1	-11	7	47	50	-1	-9	7	159	-133
1	5	7	56	50	1	3	7	14	-43	3	-11	7	93	111
-2	-12	7	69	-80	-2	-10	7	10	7	-2	4	7	10	-5
-2	6	7	44	-37	2	-8	7	113	-101	0	0	7	522	500
0	2	7	93	83	0	-6	7	422	421	0	-8	7	100	86
-2	-4	7	105	-98	-2	-2	7	386	-382	-3	-13	7	96	87
3	-13	7	113	-95	-1	-5	7	232	224	-2	-14	7	62	-54
-1	-3	7	359	342	-1	-1	7	101	-94	-8	-6	7	140	136
1	-3	7	294	298	7	1	7	25	20	7	-1	7	10	1
-8	2	7	50	55	-7	5	7	37	49	7	-7	7	58	-45
7	-9	7	142	147	-7	-9	7	258	237	5	5	7	10	-23
5	-13	7	84	71	4	6	7	158	155	-3	9	7	101	-88
-4	8	7	140	138	2	8	7	111	-97	4	-14	7	76	77
3	7	7	66	76	-1	-15	7	62	32	-1	9	7	272	242
-8	-4	7	48	-44	1	-15	7	154	136	-8	-2	7	155	138
-8	0	7	358	333	-6	-10	7	35	5	-7	-7	7	62	58
6	2	7	129	-120	6	0	7	106	124	7	-3	7	111	104
-7	3	7	250	243	7	-5	7	100	96	-6	6	7	98	100
6	-8	7	10	18	-5	-11	7	79	-48	6	-10	7	28	30
5	3	7	206	-173	0	-4	7	217	-221	-5	7	7	47	41
0	-2	7	27	-13	5	-11	7	89	-73	-4	-12	7	177	168
3	1	8	37	-28	3	-1	8	103	102	-3	1	8	46	-40
2	4	8	107	132	3	-3	8	604	590	-3	3	8	20	34
2	2	8	10	35	3	-5	8	53	-51	-3	5	8	51	-87
3	-7	8	110	95	3	-9	8	261	230	-2	2	8	203	-198
-3	-7	8	10	0	3	3	8	201	213	-4	-8	8	69	61
-4	2	8	52	50	4	-4	8	196	187	-4	4	8	224	-275
-4	-6	8	286	258	4	-6	8	10	28	4	-8	8	53	-94
-4	-4	8	177	161	4	2	8	40	35	4	-10	8	80	87
-4	-2	8	208	-204	-3	-11	8	152	-204	4	0	8	57	-19
-4	0	8	232	220	-3	-9	8	149	163	4	-2	8	85	-80
-6	-2	8	17	16	-5	-1	8	71	64	5	-1	8	73	-93
-6	0	8	28	-53	-5	1	8	48	41	5	-3	8	78	-165
-6	2	8	208	-194	-5	3	8	313	389	5	-5	8	25	28
-5	-9	8	225	255	-5	-7	8	22	19	5	-7	8	150	-168
-5	-5	8	131	125	-4	-10	8	116	157	-5	-3	8	559	542
-6	-6	8	44	-116	-1	-13	8	106	-94	-6	-4	8	188	-237
-1	-1	8	144	141	1	-1	8	129	-122	-1	1	8	10	8
1	-3	8	367	-376	1	-5	8	10	16	1	-7	8	151	-146
-2	-2	8	227	225	-2	0	8	87	59	2	-2	8	358	371
2	-4	8	50	-42	2	-6	8	604	600	-1	-7	8	111	116
-1	-5	8	76	70	-3	-5	8	61	-47	-3	-3	8	329	-324
-3	-1	8	109	-103	-2	-6	8	480	491	-2	-4	8	171	-168
0	-10	8	166	164	0	4	8	171	-167	0	2	8	60	58
1	1	8	10	-5	-1	3	8	274	246	-1	5	8	95	125
1	-9	8	85	100	1	-11	8	207	-203	0	-12	8	509	582
2	-10	8	79	-67	2	-12	8	124	-128	-1	-11	8	168	161
-1	-9	8	279	241	1	5	8	117	-128	1	3	8	54	53
3	-11	8	62	90	-2	-12	8	144	-160	-2	-10	8	10	-8
-2	-8	8	110	102	-2	4	8	70	62	-2	6	8	287	255
2	-8	8	152	135	0	0	8	300	309	0	-2	8	167	-165
0	-4	8	383	384	0	-6	8	155	138	0	-8	8	60	76
5	1	8	32	34	1	-13	8	10	-11	-5	5	8	47	39
5	-9	8	66	-39	0	6	8	176	-144	0	-14	8	20	-7
-7	-5	8	88	-75	-7	-3	8	55	-24	-7	-1	8	10	-26
-7	1	8	10	-28	-6	-8	8	22	-29	6	-4	8	41	-35
2	-14	8	35	16	6	-6	8	230	205	1	7	8	10	18

H	K	L	FO	FC	H	K	L	FO	FC	H	K	L	FO	FC
-4	6	8	136	-111	4	-12	8	222	210	-1	7	8	10	-24
-3	-13	8	94	73	3	5	8	66	50	-3	7	8	10	17
3	-13	8	51	-36	-2	-14	8	33	31	-1	-3	8	999	999
2	6	8	263	216	-8	-6	8	240	227	7	-1	8	44	39
7	-3	8	135	129	-8	2	8	59	68	7	-5	8	45	-55
-7	5	8	10	5	7	-7	8	59	65	-7	-9	8	50	63
-6	6	8	154	156	6	-10	8	89	-84	6	2	8	105	104
-5	7	8	32	34	5	-13	8	46	-33	-4	8	8	48	-52
4	-14	8	47	-52	-2	8	8	10	-4	-1	-15	8	178	186
0	8	8	107	-94	-8	-4	8	14	22	1	-15	8	130	-118
-8	-2	8	83	-75	-8	0	8	93	93	-6	-10	8	10	-13
-7	-7	8	56	44	6	0	8	345	323	6	-2	8	158	142
-6	4	8	59	56	-7	3	8	66	-44	6	-8	8	59	42
-5	-11	8	170	147	5	3	8	39	22	5	-11	8	74	-75
-4	-12	8	424	366	4	4	8	10	-7	2	0	8	378	371
3	1	9	78	-90	-3	-1	9	88	-72	3	-1	9	10	8
-3	1	9	94	86	3	-3	9	91	101	-3	3	9	440	453
2	2	9	191	215	3	-5	9	140	-143	2	0	9	170	156
-2	0	9	442	417	3	-7	9	57	37	2	-2	9	55	-48
3	-9	9	44	27	-3	-7	9	187	-180	-4	-10	9	46	64
-4	-8	9	116	-103	-4	2	9	68	-87	4	-4	9	240	-239
-4	4	9	94	84	4	-6	9	247	-260	-4	-6	9	10	-5
4	-8	9	115	-114	-4	-4	9	55	67	4	-10	9	80	-64
-4	-2	9	10	4	-3	-11	9	35	39	4	0	9	96	72
-4	0	9	74	92	-3	-9	9	80	-52	4	-2	9	14	3
-6	-2	9	180	217	-5	-1	9	87	76	-6	0	9	426	451
-5	1	9	92	-133	5	-3	9	250	256	-5	3	9	53	-39
5	-5	9	99	119	-5	-9	9	339	368	5	-7	9	14	4
-5	-7	9	113	151	-5	-5	9	103	-103	-5	-3	9	220	222
2	4	9	67	-59	-6	-6	9	327	390	-1	-13	9	150	117
-6	-4	9	79	75	1	5	9	14	14	5	-1	9	17	9
1	-13	9	129	-106	5	-9	9	293	266	4	2	9	121	-97
3	3	9	187	-155	0	6	9	10	-5	-3	5	9	56	-42
0	-14	9	94	-86	-7	-5	9	79	64	-7	-3	9	102	106
-2	6	9	343	317	-7	-1	9	66	-46	-6	-8	9	168	142
-6	2	9	112	105	2	-14	9	37	30	-4	6	9	84	-74
4	-12	9	40	4	1	-3	9	194	176	-1	-3	9	302	319
-1	-1	9	67	65	1	-1	9	40	-44	1	-5	9	136	135
1	-7	9	113	-111	-2	-2	9	138	205	2	-4	9	103	101
-1	-7	9	81	69	-1	-5	9	216	-220	-3	-5	9	119	126
-3	-3	9	154	142	-2	-6	9	691	686	-2	-4	9	173	178
0	-10	9	54	-51	0	-8	9	220	-210	0	4	9	199	238
0	2	9	93	-68	1	1	9	102	81	-1	1	9	93	-80
-1	3	9	256	-230	-1	5	9	20	0	1	-9	9	241	243
1	-11	9	147	150	0	-12	9	114	-194	2	-10	9	70	-61
2	-12	9	256	233	-1	-11	9	144	-140	-1	-9	9	246	213
1	3	9	557	605	3	-11	9	92	-106	-2	-12	9	322	320
-2	-10	9	94	-87	-2	-8	9	132	126	-2	2	9	268	263
-2	4	9	10	-49	2	-6	9	573	558	2	-8	9	10	-1
0	0	9	269	276	0	-2	9	10	10	0	-4	9	171	-170
0	-6	9	331	-332	-1	7	9	110	-100	-3	-13	9	164	-136
3	-13	9	155	136	-2	-14	9	33	20	-8	-6	9	114	107
-8	-4	9	73	70	-8	-2	9	71	-60	7	-3	9	57	-50
-8	0	9	125	-98	-7	3	9	112	105	7	-5	9	46	-38
7	-7	9	10	14	-7	-9	9	148	-133	6	-10	9	10	25
6	0	9	36	30	-5	-13	9	54	44	5	3	9	280	262
-4	-14	9	85	-72	4	4	9	115	114	-3	7	9	53	60
2	6	9	224	220	4	-14	9	44	-41	3	5	9	10	0
-1	-15	9	136	208	1	7	9	75	67	1	-15	9	10	-11
-6	-10	9	27	-28	-7	-7	9	98	-84	6	-2	9	130	-115

H	K	L	FO	FC	H	K	L	FO	FC	H	K	L	FO	FC
-7	1	9	44	46	6	-4	9	55	37	-6	4	9	27	-18
6	-6	9	215	194	6	-8	9	22	-19	-5	-11	9	59	-61
5	1	9	50	32	-5	5	9	22	20	5	-11	9	155	125
-4	-12	9	116	-79	3	1	10	66	64	-3	-1	10	80	68
3	-1	10	71	-101	-3	1	10	28	23	-1	-1	10	89	-77
-1	-3	10	114	-104	1	-5	10	20	-18	-2	-4	10	51	52
-1	-5	10	37	49	-2	-6	10	35	-43	0	0	10	385	345
0	-12	10	108	88	0	-10	10	115	-110	0	-8	10	137	124
0	2	10	10	3	1	1	10	56	-43	1	-1	10	87	70
-1	1	10	36	18	1	-3	10	382	364	-1	3	10	49	-20
1	-7	10	186	187	1	-9	10	561	549	1	-11	10	70	104
2	-12	10	118	106	-1	-11	10	47	-57	-1	-9	10	40	-11
-1	-7	10	110	-102	1	3	10	227	219	-2	-12	10	329	319
-2	-10	10	113	98	-2	-8	10	174	-163	-2	2	10	84	-78
2	-4	10	52	54	-2	4	10	77	-70	2	-6	10	119	123
2	-8	10	124	-109	2	-10	10	174	182	0	-2	10	102	98
0	-4	10	244	-254	0	-6	10	291	275	3	-3	10	130	143
2	2	10	167	-184	-3	3	10	250	294	-2	-2	10	351	-355
3	-5	10	67	74	2	0	10	263	-256	-2	0	10	85	-69
3	-7	10	112	-96	2	-2	10	216	-222	3	-9	10	187	-266
3	-11	10	10	8	-3	-9	10	353	322	-3	-7	10	109	105
-3	-5	10	17	-11	-4	-10	10	155	-188	-3	-3	10	647	617
-4	2	10	17	-16	-4	-8	10	20	-12	4	-4	10	10	-8
4	-6	10	249	339	-4	-6	10	221	223	4	-8	10	210	229
-4	-4	10	267	-255	-4	-2	10	141	138	-3	-11	10	141	170
-4	0	10	173	159	4	-2	10	85	115	-6	-2	10	148	-174
-5	-1	10	65	-87	-5	1	10	28	-24	-5	-7	10	62	-81
-5	-5	10	58	-49	-5	-3	10	292	-275	-6	-6	10	10	8
-1	-13	10	20	11	-6	-4	10	102	144	-1	5	10	100	-75
5	-3	10	70	74	-5	3	10	30	57	5	-5	10	10	-28
1	-13	10	78	70	5	-7	10	100	93	0	4	10	10	-8
4	0	10	363	326	-4	4	10	93	89	4	-10	10	36	-16
0	6	10	166	139	0	-14	10	53	47	-7	-3	10	448	399
-2	6	10	10	-10	-6	-8	10	86	-69	-6	0	10	197	199
2	-14	10	10	10	4	2	10	36	39	1	5	10	121	110
4	-12	10	298	278	-3	-13	10	25	36	3	3	10	39	32
-3	5	10	123	109	3	-13	10	84	-71	-2	-14	10	14	10
2	4	10	87	-78	-8	-6	10	89	108	-8	-4	10	96	-89
-8	-2	10	122	115	-8	0	10	32	41	-7	3	10	135	130
-7	-3	10	79	81	6	-8	10	47	-47	6	-10	10	93	79
-5	-13	10	41	48	6	-2	10	10	-11	-6	4	10	30	-16
5	1	10	67	-65	-4	-14	10	10	-7	-5	5	10	72	-60
-4	6	10	264	243	3	5	10	89	-73	-1	-15	10	33	-27
-1	7	10	89	76	1	-15	10	230	213	-6	-10	10	39	18
-7	-7	10	10	-1	-7	-5	10	22	7	-7	-1	10	39	28
-6	2	10	76	75	-7	1	10	10	41	6	-4	10	40	41
6	-6	10	101	102	-5	-11	10	95	-80	5	-1	10	61	40
5	-9	10	378	347	5	-11	10	39	-36	-4	-12	10	158	-118
-5	-9	10	69	73	-2	-8	11	20	-1	-3	-1	11	63	57
3	-1	11	10	46	-2	-6	11	110	-89	-3	1	11	93	-134
-2	-4	11	123	-125	3	-3	11	447	556	3	-5	11	45	70
-2	-2	11	88	93	2	0	11	118	99	3	-7	11	10	-34
-2	0	11	93	93	2	-2	11	215	214	3	-9	11	227	272
-3	-9	11	94	92	-3	-7	11	73	75	-3	-5	11	94	-86
-4	-10	11	28	45	-3	-3	11	149	145	-4	2	11	45	42
0	0	11	296	277	0	-12	11	295	341	0	-10	11	102	93
0	-8	11	143	135	0	-6	11	595	581	0	-4	11	328	317
0	2	11	126	160	0	-2	11	30	-17	1	1	11	83	-119
-1	-1	11	40	-24	1	-1	11	10	0	-1	1	11	103	90
1	-3	11	134	-114	-1	3	11	357	315	1	-5	11	109	-98

H	K	L	FO	FC	H	K	L	FO	FC	H	K	L	FO	FC
1	-7	11	10	-12	1	-9	11	10	-7	1	-11	11	178	-239
-1	-11	11	108	152	-1	-9	11	306	300	-1	-7	11	14	-24
-1	-5	11	135	132	-1	-3	11	408	389	-2	-12	11	41	58
-2	-10	11	62	40	-2	2	11	155	-209	2	-4	11	83	-79
2	-6	11	95	115	2	-8	11	27	27	2	-10	11	76	-126
-4	-8	11	170	181	4	-4	11	170	181	4	-6	11	158	167
-4	-6	11	601	568	4	-8	11	10	-22	-4	-4	11	165	154
-4	-2	11	36	-37	-3	-11	11	112	-125	-4	0	11	145	206
-5	-1	11	69	-86	-5	-7	11	28	-87	-5	-5	11	116	168
-5	-3	11	131	166	2	2	11	33	-20	-2	4	11	49	42
2	-12	11	62	-34	-1	-13	11	156	-135	-6	-4	11	125	-120
1	3	11	66	-39	-5	1	11	76	61	1	-13	11	54	33
4	-2	11	54	-49	4	-10	11	70	48	0	4	11	115	-96
3	1	11	71	50	-3	3	11	182	-156	0	-14	11	67	57
3	-11	11	79	62	-6	-8	11	87	-72	-6	-6	11	187	-147
-6	-2	11	83	-74	2	-14	11	76	-68	-6	0	11	10	19
-5	-9	11	161	170	4	0	11	236	237	-4	4	11	142	-139
4	-12	11	233	222	-1	5	11	10	5	-3	-13	11	114	85
-3	5	11	10	-8	3	-13	11	88	-77	-2	-14	11	65	-49
-8	-6	11	236	222	-8	-4	11	36	-7	-8	-2	11	10	-16
-7	1	11	66	-50	-7	-9	11	191	173	6	-8	11	10	-1
-5	-13	11	89	-84	6	-4	11	81	-70	6	-6	11	128	131
-4	-14	11	87	88	5	-11	11	85	-90	4	2	11	93	104
2	4	11	98	92	-2	6	11	10	-6	3	3	11	151	131
-1	-15	11	106	-104	1	5	11	46	-46	0	6	11	40	-5
1	-15	11	190	170	-6	-10	11	67	61	-7	-7	11	81	77
-7	-5	11	63	-48	-7	-3	11	169	164	-7	-1	11	62	54
-6	2	11	150	-140	-5	-11	11	111	93	5	-1	11	32	-39
5	-3	11	202	-180	-5	3	11	360	333	5	-5	11	55	-40
5	-7	11	41	-36	5	-9	11	10	19	-4	-12	11	281	233
-2	-8	12	150	141	-3	-1	12	88	-105	-2	-6	12	174	160
-3	1	12	54	66	3	-3	12	46	71	-2	-4	12	32	-15
3	-5	12	10	-92	-2	-2	12	170	170	3	-7	12	100	134
-2	0	12	557	617	2	-2	12	10	32	3	-9	12	393	380
-3	-9	12	280	-370	-3	-7	12	135	-127	-3	-5	12	10	-19
0	0	12	163	-259	0	-2	12	81	-72	0	-12	12	136	-131
0	-10	12	39	57	0	-8	12	277	-267	0	-6	12	66	75
0	-4	12	50	-42	-1	-1	12	105	86	1	-1	12	107	-139
-1	1	12	78	-108	1	-3	12	188	183	1	-5	12	33	13
1	-7	12	114	-112	1	-9	12	226	-244	1	-11	12	66	59
-1	-11	12	30	-16	-1	-9	12	583	555	-1	-7	12	71	71
-1	-5	12	40	-45	-1	-3	12	147	133	1	1	12	117	88
-2	-10	12	188	-218	2	-4	12	10	-13	2	-6	12	179	191
2	-8	12	94	131	2	-10	12	140	-140	-4	-10	12	104	94
-3	-3	12	95	107	-4	-8	12	144	-213	-4	-6	12	190	172
-4	-4	12	146	148	-4	-2	12	70	-100	-3	-11	12	40	-42
-4	0	12	79	-104	-5	-1	12	66	56	-5	-7	12	30	63
-5	-5	12	17	7	-5	-3	12	262	318	-2	-12	12	218	216
2	0	12	336	294	-2	2	12	152	157	2	-12	12	317	289
-1	-13	12	92	76	0	2	12	39	-33	4	-4	12	141	-135
4	-6	12	98	-80	4	-8	12	166	-151	0	4	12	53	61
3	-1	12	79	70	0	-14	12	81	-69	3	-11	12	28	-23
-2	4	12	74	68	-6	-6	12	194	175	-6	-4	12	10	-12
-6	-2	12	190	170	-5	-9	12	376	338	4	-2	12	64	-65
-4	2	12	10	-2	1	3	12	146	143	-1	3	12	133	123
4	-10	12	10	12	-3	-13	12	91	-78	3	1	12	75	-68
1	-13	12	67	-55	-3	3	12	28	13	3	-13	12	132	116
-2	-14	12	10	-8	2	2	12	89	86	-7	-1	12	22	-32
-7	-9	12	83	-60	-7	-7	12	42	-40	-6	-10	12	93	-86
-6	2	12	75	67	5	-1	12	65	-59	5	-3	12	115	106

H	K	L	FO	FC	H	K	L	FO	FC	H	K	L	FO	FC
-5	3	12	181	169	-4	-14	12	51	-41	5	-9	12	10	22
5	-11	12	81	81	-3	5	12	100	-97	4	0	12	90	-78
-4	4	12	10	16	4	-12	12	38	-83	2	-14	12	49	41
-1	-15	12	158	153	-1	5	12	80	73	1	-15	12	77	87
-6	-8	12	132	117	-7	-5	12	10	-8	-7	-3	12	61	-47
-6	0	12	320	293	-5	-11	12	27	-7	-5	1	12	36	-15
5	-5	12	68	51	5	-7	12	35	-28	-4	-12	12	44	37
2	-14	13	66	51	-1	-15	13	99	96	1	3	13	96	76
1	-15	13	163	167	-6	-8	13	22	-17	-6	-6	13	258	217
-6	-4	13	69	63	-6	-2	13	74	-72	-5	-11	13	66	-55
-5	1	13	62	-70	0	0	13	69	-72	0	-2	13	85	129
0	-10	13	114	-174	0	-8	13	55	66	0	-6	13	176	177
0	-4	13	192	-180	-1	-1	13	45	-66	-1	-1	13	52	56
1	-3	13	542	644	-1	-5	13	97	89	1	-7	13	20	28
1	-9	13	266	371	1	-11	13	104	105	-1	-11	13	62	-83
-1	-9	13	97	63	-1	-7	13	53	51	-1	-5	13	65	-52
-1	-3	13	274	-268	-2	-10	13	115	158	2	-4	13	104	138
2	-6	13	82	102	2	-8	13	10	-56	2	-10	13	195	179
-4	-12	13	50	-33	-1	3	13	66	66	-3	-13	13	36	-11
1	-13	13	10	3	3	-1	13	51	-46	3	-11	13	68	-57
-7	-1	13	22	-33	-7	-7	13	63	-50	-6	-10	13	10	-13
-7	-5	13	41	45	-7	-3	13	157	157	-6	0	13	182	181
5	-3	13	253	237	5	-5	13	30	16	5	-7	13	10	23
5	-9	13	172	171	3	1	13	45	-32	-3	3	13	162	143
3	-13	13	54	-26	-2	-14	13	103	84	4	-12	13	27	-21
2	2	13	28	-46	-2	4	13	62	-57	-2	-8	13	46	-51
-3	-1	13	10	12	-2	-6	13	169	139	-2	-4	13	69	63
3	-5	13	17	-7	-2	-2	13	216	-254	3	-7	13	28	7
-2	0	13	193	187	2	-2	13	161	-158	-3	-9	13	257	306
-3	-7	13	22	-32	-3	-5	13	66	98	-3	-3	13	469	540
-4	-8	13	80	-76	-4	-6	13	87	-190	-4	-4	13	223	-289
-4	-2	13	25	54	-5	-5	13	94	-88	-2	-12	13	361	317
-1	1	13	78	-73	-5	-3	13	92	-79	-5	-1	13	10	21
0	-12	13	70	-55	-4	-10	13	112	-96	-4	0	13	69	-59
-3	-11	13	132	119	0	2	13	93	-90	-3	1	13	82	86
3	-3	13	180	-151	3	-9	13	22	46	0	-14	13	10	-7
2	0	13	102	92	-2	2	13	27	-1	2	-12	13	371	341
-1	-13	13	58	53	-5	-9	13	55	55	-5	-7	13	17	27
4	-2	13	124	116	-4	2	13	84	-68	4	-4	13	10	-20
4	-6	13	232	227	1	1	13	62	49	4	-8	13	136	121
4	-10	13	66	-61	2	-10	13	10	-6	-3	-3	14	136	139
-2	-8	14	83	-151	0	-2	14	71	68	0	-10	14	10	-12
0	-8	14	181	231	0	-6	14	484	567	0	-4	14	202	234
1	-3	14	108	109	1	-5	14	80	-118	1	-7	14	42	90
1	-9	14	136	143	-1	-9	14	49	-117	-1	-7	14	87	-120
-1	-5	14	54	89	-1	-3	14	139	139	-2	-10	14	120	115
2	-6	14	127	-117	2	-8	14	52	-58	-2	-6	14	20	-43
-2	-4	14	10	-38	-2	-2	14	32	18	-3	-9	14	411	412
-3	-7	14	90	146	-3	-5	14	10	-43	-4	-6	14	242	265
-4	-4	14	74	69	-2	0	14	59	-27	2	-4	14	68	-55
-1	-11	14	10	12	-1	-1	14	115	-104	1	-1	14	98	94
-5	-5	14	28	12	-5	-3	14	124	133	1	-11	14	83	-83
-4	-10	14	27	-19	-4	-8	14	220	201	-4	-2	14	41	27
-3	-11	14	47	-41	0	0	14	272	224	-3	-1	14	113	105
3	-7	14	78	-58	2	-2	14	75	87	2	-12	14	10	4
-1	-13	14	122	-110	-5	-7	14	35	-24	-4	0	14	287	250
4	-6	14	323	310	4	-8	14	10	10	-1	1	14	89	81
-3	-13	14	56	43	1	-13	14	35	38	-3	1	14	37	-88
3	-3	14	104	92	3	-5	14	41	46	3	-9	14	130	134
3	-11	14	10	19	-2	-12	14	20	-6	-7	-7	14	71	59

H	K	L	FO	FC	H	K	L	FO	FC	H	K	L	FO	FC
-6	-10	14	130	113	-7	-5	14	28	27	-7	-3	14	93	81
-6	-2	14	78	-74	-6	0	14	169	-154	-5	-11	14	44	27
-5	1	14	78	63	3	-1	14	58	-63	3	-13	14	81	-79
4	-2	14	14	12	-4	2	14	10	7	4	-4	14	120	120
-2	-14	14	78	-71	4	-10	14	28	-13	2	0	14	98	91
-2	2	14	54	-51	2	-14	14	127	-114	-1	-15	14	66	-57
0	2	14	68	63	1	1	14	88	-83	-1	3	14	222	192
0	-14	14	92	78	-6	-8	14	101	-96	-6	-6	14	120	122
-6	-4	14	10	-16	-5	-3	14	176	-140	-5	-1	14	92	-82
-4	-12	14	308	290	0	-12	14	252	226	0	-14	14	86	78
-2	-8	15	71	58	-2	-6	15	126	113	-2	-4	15	84	-76
-3	-7	15	28	-5	-2	-10	15	202	-189	-2	-2	15	137	121
2	-6	15	40	29	2	-8	15	70	52	-1	-11	15	60	47
-1	-3	15	346	297	1	-3	15	40	-10	1	-5	15	51	-49
1	-7	15	30	-27	1	-9	15	91	-74	0	-8	15	186	-190
0	-6	15	47	37	0	-4	15	10	7	-1	-9	15	283	278
-1	-7	15	10	-8	-1	-5	15	52	48	-4	-8	15	76	-69
0	-2	15	111	-95	-4	-6	15	113	99	-4	-4	15	122	104
0	-10	15	91	72	-3	-9	15	10	5	0	0	15	48	-18
-3	-3	15	194	-155	-2	0	15	156	147	2	-2	15	10	15
2	-4	15	96	-89	2	-10	15	146	-134	-1	-13	15	10	22
-4	-2	15	57	-42	-1	-1	15	76	55	1	-1	15	68	-63
-3	-11	15	88	-77	1	-11	15	41	-14	-3	-1	15	60	-41
3	-5	15	30	24	3	-7	15	57	49	3	-9	15	344	329
-2	-12	15	144	-117	-6	-8	15	45	46	-6	-6	15	117	121
-6	-4	15	10	-20	-6	-2	15	137	133	-5	-11	15	35	26
-5	-1	15	35	32	-4	-12	15	274	257	-3	1	15	36	-30
3	-3	15	113	99	3	-11	15	57	51	-4	0	15	199	191
4	-6	15	42	48	-2	-14	15	48	-42	4	-8	15	132	-124
4	-10	15	81	56	-3	-13	15	32	-10	2	-12	15	10	39
-1	1	15	14	16	1	-13	15	42	10	-5	-9	15	125	116
-5	-7	15	41	-54	-5	-5	15	53	47	-5	-3	15	376	351
-4	-10	15	93	88	-3	-5	15	82	-79	0	-12	15	205	184
0	-14	15	14	-30	-2	-8	16	30	24	-2	-6	16	398	346
-2	-4	16	52	42	-1	-9	16	25	32	-1	-7	16	111	87
-1	-5	16	95	-73	0	-6	16	177	-137	0	-8	16	10	24
-3	-7	16	62	-40	-3	-5	16	87	71	0	-2	16	10	-11
0	-4	16	117	-107	0	-10	16	10	-8	-2	-2	16	76	-77
2	-6	16	345	300	2	-8	16	20	27	2	-10	16	134	115
-1	-11	16	10	9	-1	-3	16	85	73	1	-3	16	173	166
1	-5	16	119	105	1	-7	16	47	-32	1	-9	16	261	245
1	-11	16	37	41	-3	-11	16	60	51	-3	-9	16	171	185
-3	-3	16	63	69	-2	-12	16	160	149	-2	-10	16	48	34
-6	-6	16	212	193	-5	-9	16	149	135	-5	-3	16	121	109
-4	-12	16	56	62	-3	-1	16	83	-82	3	-5	16	72	-66
3	-7	16	65	58	3	-9	16	28	-25	3	-11	16	40	-40
-4	-2	16	52	-50	-2	0	16	81	68	2	-2	16	53	-41
2	-4	16	89	91	-3	-13	16	22	-20	2	-12	16	175	172
-1	-13	16	75	74	0	0	16	14	-32	-1	-1	16	48	56
1	-1	16	25	-25	1	-13	16	53	-49	-5	-7	16	71	57
-5	-5	16	46	-53	-4	-8	16	105	-95	-4	-6	16	218	-184
-4	-4	16	150	-144	0	-12	16	96	105	0	-14	16	73	-66
-4	-10	16	10	-11	0	-4	17	66	53	0	-6	17	114	102
0	-8	17	145	136	0	-10	17	61	-51	-1	-11	17	66	-61
-1	-9	17	212	-180	-1	-7	17	63	-56	-1	-5	17	41	-33
1	-7	17	49	46	1	-9	17	329	308	-3	-9	17	330	320
-3	-7	17	20	34	-3	-5	17	47	60	-2	-10	17	117	109
-2	-8	17	71	-58	-2	-6	17	210	208	-2	-4	17	80	78
-5	-9	17	61	-55	-5	-7	17	10	14	-5	-5	17	32	-37
-3	-3	17	134	117	-4	-10	17	45	-47	-4	-4	17	17	6

H	K	L	FO	FC	H	K	L	FO	FC	H	K	L	FO	FC
-2	-12	17	100	94	-2	-2	17	17	16	2	-8	17	97	-100
2	-10	17	10	10	-3	-11	17	39	25	0	-12	17	142	147
-1	-13	17	44	-36	0	-2	17	81	73	-1	-3	17	99	100
1	-3	17	39	31	1	-5	17	10	7	1	-11	17	25	-15
-4	-8	17	149	148	-4	-6	17	101	94	2	-6	17	81	85
-4	-8	18	35	-39	-4	-6	18	274	251	-2	-12	18	66	-48
-2	-10	18	139	-130	-2	-8	18	22	-16	-2	-6	18	102	-86
-2	-4	18	69	-55	-3	-11	18	42	-39	-3	-9	18	32	-21
-3	-7	18	57	57	-3	-5	18	115	-109	-1	-11	18	55	49
-1	-9	18	179	156	-1	-7	18	92	-86	-1	-5	18	90	78
0	-4	18	10	-16	0	-6	18	113	89	0	-8	18	87	-92
0	-10	18	71	55	1	-7	18	47	58	1	-9	18	39	38

TALK II

AUFSTELLUNG: C_T .

H	K	L	FO	FC	H	K	L	FO	FC	H	K	L	FO	FC
0	0	2	22	-12	0	0	4	78	47	0	0	6	142	-138
1	0	2	169	-150	1	0	4	193	-167	2	0	0	17	-21
2	0	2	164	-160	2	0	4	106	82	3	0	2	30	-11
3	0	4	25	-3	4	0	0	30	-34	4	0	2	84	-93
4	0	4	76	78	5	0	2	36	12	5	0	4	42	52
6	0	0	111	132	6	0	2	89	-104	6	0	4	57	66
7	0	2	33	28	8	0	0	79	89	8	0	2	53	-65
8	0	4	33	34	9	0	2	36	30	10	0	0	79	95
7	0	4	10	2	1	1	0	17	-17	1	1	1	22	15
1	1	3	69	-45	2	1	1	82	-69	2	1	2	69	42
2	1	4	53	-39	3	1	0	141	-153	3	1	1	40	42
3	1	2	62	53	3	1	3	41	36	3	1	4	49	-38
4	1	1	46	56	4	1	2	48	46	4	1	4	83	75
5	1	0	81	89	5	1	2	84	92	5	1	3	52	-52
5	1	4	41	-42	6	1	1	35	-30	6	1	2	76	-91
6	1	4	60	-59	7	1	0	48	-72	7	1	1	33	30
7	1	2	44	-44	8	1	2	46	40	9	1	2	41	38
5	1	1	10	-3	4	1	3	10	9	2	1	3	17	-13
1	1	4	10	-9	0	2	2	28	-19	0	2	3	246	-200
0	2	5	49	-36	1	2	1	168	-165	1	2	2	27	19
1	2	3	17	-14	1	2	4	58	-43	1	2	5	57	48
2	2	0	85	-113	2	2	1	93	99	2	2	2	33	29
2	2	3	33	25	2	2	4	35	-24	2	2	5	92	74
3	2	1	14	22	3	2	2	47	48	3	2	3	20	19
3	2	4	33	25	4	2	0	27	-25	4	2	1	39	54
4	2	2	83	95	4	2	3	42	-32	4	2	4	44	-33
5	2	2	39	-43	6	2	1	49	54	6	2	3	40	-41
8	2	0	42	-49	8	2	1	37	40	9	2	1	33	36
5	2	1	17	14	7	2	1	10	-2	6	2	0	10	8
0	0	4	14	46	1	3	0	48	65	1	3	1	90	-61
1	3	2	48	-29	1	3	3	181	118	1	3	5	66	-45
2	3	1	74	55	2	3	2	35	19	2	3	4	39	-31
2	3	5	39	-30	3	3	0	42	-52	3	3	1	122	-127
3	3	2	39	37	3	3	3	126	101	3	3	5	50	-30
4	3	1	79	98	4	3	2	25	-30	4	3	5	45	-30
5	3	0	28	-27	5	3	1	138	-159	5	3	3	57	-64
5	3	5	109	-111	6	3	1	127	-147	6	3	3	37	-30
6	3	5	54	68	7	3	0	37	57	7	3	3	127	138
8	3	1	46	40	8	3	3	28	20	9	3	1	57	-51
9	3	3	36	43	7	3	1	10	-4	5	3	2	22	-23
6	3	2	17	13	7	3	2	17	-15	4	3	3	17	14
2	3	3	10	7	0	4	2	114	-101	0	4	3	174	-149
0	4	4	45	39	0	4	5	59	-47	1	4	1	126	-129
1	4	2	85	88	1	4	4	36	34	1	4	5	42	33
2	4	0	47	65	2	4	1	36	41	2	4	2	45	52
2	4	3	56	51	2	4	5	57	48	3	4	1	27	21
3	4	2	35	-30	3	4	4	49	-50	4	4	0	52	-78
5	4	4	44	38	6	4	0	30	38	8	4	0	45	50
4	4	1	10	1	5	4	1	17	15	6	4	1	25	31
1	4	3	10	-4	3	4	3	17	18	4	4	3	10	-1
5	4	3	17	-18	2	4	4	10	-8	4	4	4	17	-10
1	5	0	87	85	1	5	1	52	39	1	5	2	38	-65
1	5	3	85	-59	1	5	4	57	31	2	5	1	52	-50
3	5	0	51	59	3	5	4	42	26	4	5	2	51	-63
4	5	4	52	-44	5	5	0	51	-56	5	5	2	77	-93
5	5	4	44	47	6	5	2	53	64	6	5	4	67	73
7	5	0	107	121	7	5	1	35	35	2	5	2	17	16
3	5	2	10	4	2	5	4	10	-6	0	6	1	65	50
0	6	2	66	-49	0	6	3	66	44	1	6	1	32	40
1	6	2	125	110	1	6	3	32	22	1	6	4	94	76

H	K	L	FO	FC	H	K	L	FO	FC	H	K	L	FO	FC
2	6	2	101	110	2	6	4	57	-54	4	6	0	41	-50
4	6	2	55	81	4	6	4	42	-57	6	6	0	32	-37
6	6	2	33	30	8	6	0	39	-40	3	6	2	10	4
5	6	2	25	-31	3	6	4	17	-13	0	6	4	17	-9
2	6	0	17	-9										

PROTOENSTATIT

Literaturverzeichnis

- L. ATLAS - Polymorphism of $MgSiO_3$ and solid-state equilibria in the system $MgSiO_3$ - $CaMgSi_2O_6$. J. Geol. 2 1952
- R. BÖHME - Die Kristall- und Molekülstruktur des 6,6-Bisdimethylamino-fulvens. Diss.Univ. Erlangen (1970)
- W. L. BROWN, J.V.SMITH - High-temperature X-ray studies on the polymorphism of $MgSiO_3$. Z. Krist. 118 (1963) 186 - 212
- H. BURZLAFF - Über Erfahrungen mit direkten Strukturbestimmungsmethoden. Habilit.Schrift. Univ. Marburg (1967)
- H. BURZLAFF - Zur Beschreibung der Raumgruppen I. Die Raumgruppen des triklinen, monoklinen und orthorhombischen Systems. Erlangen, unveröffentl.
- K. v. GEHLEN - Orientierte Umwandlung von Talk in Protoenstatit in gebrannten Preßkörpern von Speckstein. Ber.Dtsch. Keram. Ges. 39 (1962)
- J. W. GRUNER - The Crystal Structures of Talc and Pyrophyllite. Z. Krist. 88, 412 (1934)
- H. HARALDSEN - Beiträge zur Kenntnis der thermischen Umbildung des Talkes. Neues Jb. Mineralogie 61, Beilageband, Abt. A (1930)
- S. B. HENDRICKS - On the Crystal Structure of Talk and Pyrophyllite. Z. Krist. 99, 264 (1938)
- W. LINDEMANN - Darstellung und Kristallstruktur des γ - $MgSiO_3$. Diss. Univ. Erlangen (1951)
- W. LINDEMANN - Umwandlungsmechanismus von Talk beim Erhitzen, dargestellt am Steatit von Göpfersgrün sowie Talken vom Sudan und von Greiner (Zillertal). Geol.Bl. NO-Bayern Bd 5, Heft 4, Seite 143 - 148 (1955).
- >> - Thermische Zersetzung von Talken, durchgeführt am Steatit von Göpfersgrün sowie an Talken aus China, aus der Mandschurei und von Greiner (Zillertal). Geol. Bl. NO-Bayern, Bd 6, Heft 4, Seite 153 - 157 (1956)
- >> - Strukturuntersuchung der Kettensilikate unter besonderer Berücksichtigung der Mg-Pyroxene. Habil.Schr.Univ. Erlangen (1959)
- >> - Gitterkonstanten Raumgruppe und Parameter des γ - $MgSiO_3$. Naturwissenschaften Heft 11, S. 428/29 (1961)
- PAULING, L. - Proc. U.S. Nat. Acad. Sci. 16, 123 (1930)

- R. G. SCHWAB - Über die Stabilität und die Strukturbeziehungen der
Mg, Fe, Ni-Metasilikate. Diss. Univ. Erlangen (1966)
 >> - Die Phasenbeziehungen der Pyroxene im System $\text{CaMgSi}_2\text{O}_6$ -
 $\text{CaFeSi}_2\text{O}_6$ - MgSiO_3 - FeSiO_3
 Fortschr. Miner. 46(2), 3188 - 273 (1969)
- J. V. SMITH - The Crystal Structure of Protoenstatite, MgSiO_3
 Acta Cryst. Vol. 12 (7 - 12), 515 (1959)
- K. H. SCHÜLLER - Untersuchungen an Talken und Specksteinen.
 Sprechsaal Keram. Glas email Silikate (1971)
 Heft 10, S. 421 - 426
- E. THILO - Ber. d. Deutsch. Chem. Ges. (1937), 70, 2373

Lebenslauf

Am 23.2.1942 wurde ich, Basilios Perdikatsis, als Sohn des Friseurs Ioannis Perdikatsis und seiner Ehefrau Helene in Giannitsa/Griechenland geboren. Nach dem Besuch der Volksschule in Giannitsa (1948 - 1954) trat ich in das dortige Gymnasium ein, wo ich im Sommer 1960 die Reifeprüfung ablegte. Vom Wintersemester 1962/63 an studierte ich Mineralogie an der Universität Erlangen-Nürnberg, wo ich im Mai 1965 die Vordiplom- und im Mai 1969 die Diplom-Prüfung für Mineralogie ablegte. Seit Sommer 1969 befasse ich mich mit meiner Doktorarbeit.

Offsetdruck-Fotodruck

J. Hogi, 8520 Erlangen Hauptstr. 109, (Nähe Martin-Luther-Platz) Tel. 22990